I.I. GOLDMAN – W.D. KRIWTSCHENKOW

AUFGABENSAMMLUNG ZUR QUANTENMECHANIK



VEB DEUTSCHER VERLAG DER WISSENSCHAFTEN

I. I. GOLDMAN · W. D. KRIWTSCHENKOW

AUFGABENSAMMLUNG ZUR QUANTENMECHANIK



VEB DEUTSCHER VERLAG DER WISSENSCHAFTEN

I. I. GOLDMAN · W. D. KRIWTSCHENKOW

Aufgabensammlung zur Quantenmechanik

HOCHSCHULBÜCHER FÜR PHYSIK

Herausgegeben von Otto Lucke und Robert Rompe

BAND 38

AUFGABENSAMMLUNG ZUR QUANTENMECHANIK

von

I. I. GOLDMAN und W. D. KRIWTSCHENKOW

unter der Redaktion von

B. T. GEILIKMAN



VEB DEUTSCHER VERLAG DER WISSENSCHAFTEN

BERLIN 1963

И. И. Гольдман · В. Д. Кривченков
Сборник задач по квантовой механике
Под редакцией проф. Б. Т. Гейликмана
Государственное издательство технико-теоретической литературы
Москва 1957

Unter Berücksichtigung der englischen Ausgabe
ins Deutsche übertragen von Dipl.-Phys. Jürgen Burmeister
Wissenschaftlicher Bearbeiter: Dr. Manfred Porsch
Verantwortlicher Verlagslektor: Ralf Sube

Die Übersetzung der Ergänzungen in der englischen Ausgabe
erfolgte mit freundlicher Genehmigung des Verlages Pergamon Press Ltd.

ES 18 B 2

Printed in the German Democratic Republic
Lizenz Nr. 206 · 435/65/63
Schutzumschlag: Hartwig Hoeftmann
Gesamtherstellung: VEB Leipziger Druckhaus, Leipzig III/18/203

VORWORT

Die vorliegende Sammlung enthält Aufgaben zur nichtrelativistischen Quantenmechanik, die von Studenten des vierten Kurses der physikalischen Fakultät an der Staatlichen Universität Moskau in Seminaren oder als Übungsaufgaben gerechnet wurden. Die Schwierigkeitsgrade der Probleme sind unterschiedlich. Aufgaben, die verhältnismäßig umfangreiche Rechnungen erfordern, sind vorwiegend für Studenten bestimmt, die sich auf die theoretische Physik spezialisiert und als Literatur hauptsächlich die „Quantenmechanik" von LANDAU und LIFSCHIZ (bzw. das Werk „Grundlagen der Quantenmechanik" von D. I. BLOCHINZEW) benutzt haben.

Die didaktischen Erfahrungen zeigen, daß die Formulierung der Quantenmechanik in Matrizenform beim Studium die größten Schwierigkeiten bereitet. Deshalb wurden die Aufgaben über die Störungsmatrix und ihre Diagonalisierung besonders sorgfältig ausgearbeitet. Einen verhältnismäßig großen Raum nehmen die Aufgaben über Drehimpuls und Spin ein, da ohne das Verständnis dieser fundamentalen Begriffe nicht von einem ernsthaften Studium der Quantenmechanik gesprochen werden kann.

Die Autoren danken dem Aspiranten W. W. TOLMATSCHEW und den Studenten A. R. FRENKIN und W. D. KUKIN für ihre Unterstützung bei der Zusammenstellung der Aufgaben sowie dem Redakteur E. E. SHABOTINSKI für kritische Hinweise.

I. GOLDMAN, W. KRIWTSCHENKOW

INHALTSVERZEICHNIS

Aufgaben

Lösungen

AUFGABEN

1. EINDIMENSIONALE BEWEGUNG. ENERGIESPEKTRUM UND WELLENFUNKTIONEN

1.1. Man bestimme die Energieniveaus und normierten Wellenfunktionen eines Teilchens, das sich in einem Potentialkasten befindet. Die potentielle Energie des Teilchens sei durch

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad 0 \leqq x \leqq a, \\ \infty & \text{überall sonst} \end{cases}$$

gegeben.

1.2. Es ist zu zeigen, daß ein Teilchen im Potentialkasten (vgl. die vorige Aufgabe) den Beziehungen

$$\bar{x} = \frac{1}{2} a, \quad \overline{(x - \bar{x})^2} = \frac{a^2}{12}\left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2}\right)$$

genügt und daß die letzte Formel für große n mit der entsprechenden klassischen Relation übereinstimmt.

1.3. Wie sieht die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Impulswerte für ein Teilchen im Potentialkasten aus, das sich im n-ten Energiezustand befindet?

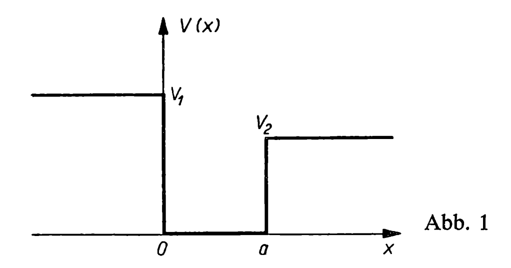


Abb. 1

1.4. Man bestimme die Energieniveaus und Wellenfunktionen eines Teilchens für den in Abb. 1 dargestellten Potentialverlauf und untersuche insbesondere den symmetrischen Fall $V_1 = V_2$.

1.5. Gesucht wird die Energie des gebundenen Zustandes eines Teilchens im Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{für} \quad 0 \leqq x \leqq a, \\ 0 & \text{überall sonst} \end{cases}$$

für $V_0 \to \infty$ und $a \to 0$ unter der Nebenbedingung $V_0 a = q$.

1.6. Der HAMILTON-Operator eines Oszillators lautet

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2 x^2}{2},$$

wobei p und x der Vertauschungsregel

$$px - xp = -i\hbar$$

genügen. Damit $\hbar$, μ und ω in den folgenden Rechnungen nicht auftreten, führen wir die neuen Variablen P und Q ein, die durch die Beziehungen

$$P = \frac{1}{\sqrt{\mu\hbar\omega}}\,p, \quad Q = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\,x, \quad (PQ - QP = -i)$$

definiert sind, so daß die Energie E in Einheiten $\hbar\omega$ ausgedrückt wird ($E = \varepsilon\hbar\omega$). Die SCHRÖDINGER-Gleichung des Oszillators lautet in den neuen Variablen

$$H'\psi = \tfrac{1}{2}(P^2 + Q^2)\,\psi = \varepsilon\psi.$$

1.6.1. Mit Hilfe der Vertauschungsregel

$$PQ - QP = -i$$

beweise man die Beziehung

$$\frac{1}{2}(P^2 + Q^2)(Q \mp iP)^n\psi = (\varepsilon \pm n)(Q \mp iP)^n\psi.$$

1.6.2. Man bestimme die normierten Wellenfunktionen und die Energieniveaus des Oszillators.

1.6.3. Man leite die Vertauschungsregel für den Operator $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP)$ und den dazu hermitesch konjugierten Operator $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP)$ ab und drücke die Wellenfunktion des n-ten angeregten Zustandes mit Hilfe des Operators a^+ durch die Wellenfunktion des Grundzustandes aus.

1.6.4. Wie lauten die Matrixelemente der Operatoren P und Q in der Energiedarstellung?

Hinweis:

$$P^2 + Q^2 - 1 = (P + iQ)(P - iQ).$$

1.7. Mit Hilfe der Ergebnisse der vorigen Aufgabe ist durch Matrizenmultiplikation zu beweisen, daß für den Oszillator im n-ten Energiezustand gilt

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} = \frac{\hbar}{\mu\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right); \quad \overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} = \mu\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

1.8. Ein Teilchen bewege sich im Potentialfeld

$$V(x) = \frac{\mu\omega^2 x^2}{2}.$$

Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, das im Grundzustand befindliche Teilchen außerhalb des klassisch erlaubten Bereichs vorzufinden?

1.9. Gesucht sind die Energieniveaus eines Teilchens, das sich im Potential

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{für} \quad x < 0, \\ \dfrac{\mu\omega^2 x^2}{2} & \text{für} \quad x > 0 \end{cases}$$

bewegt.

1.10. Man gebe die SCHRÖDINGER-Gleichung eines Oszillators in der p-Darstellung und die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Impulswerte an.

1.11. Die Wellenfunktionen und Energieniveaus eines Teilchens, das sich im Potentialfeld

$$V(x) = V_0\left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a}\right)^2 \quad (x > 0)$$

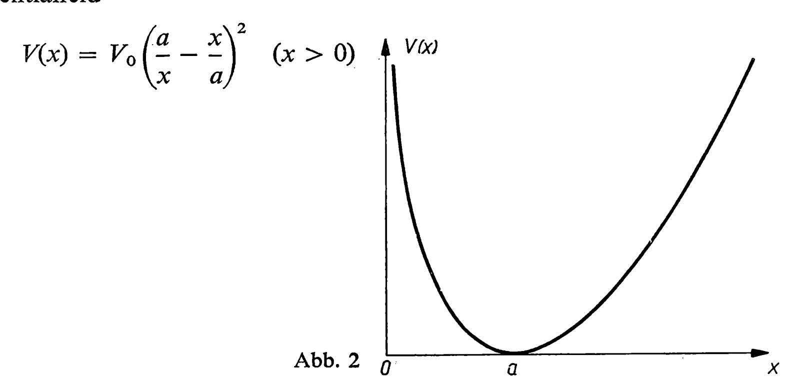


Abb. 2

bewegt (Abb. 2), sind zu bestimmen. Man zeige, daß das Energiespektrum mit demjenigen des Oszillators übereinstimmt.

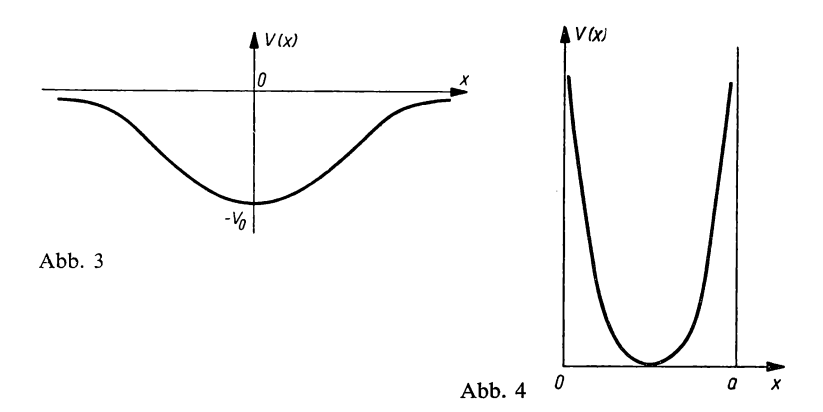


Abb. 3

Abb. 4

1.12. Gesucht werden die Energieniveaus eines Teilchens im Potentialfeld

$$V = -V_0 \frac{1}{\cosh^2 \frac{x}{a}}$$

(Abb. 3).

1.13. Ein Teilchen bewege sich im Potentialfeld

$$V = V_0 \cot^2 \frac{\pi}{a} x \quad \text{für} \quad 0 < x < a$$

(Abb. 4). Zu bestimmen sind die Energieniveaus und die Wellenfunktionen; die Wellenfunktion des Grundzustandes ist zu normieren.

Man untersuche die Grenzfälle kleiner und großer Werte von V_0.

1.14. Gefragt wird nach den Wellenfunktionen eines geladenen Teilchens in einem homogenen Feld

$$V(x) = -Fx.$$

1.15. Wie sieht die SCHRÖDINGER-Gleichung in der p-Darstellung für ein sich im periodischen Potentialfeld

$$V(x) = V_0 \cos b\, x$$

bewegendes Teilchen aus?

1.16. Die SCHRÖDINGER-Gleichung in der p-Darstellung ist für ein Teilchen anzugeben, das sich im periodischen Potentialfeld

$$V(x) = V(x + b)$$

bewegt.

1.17. Man bestimme die erlaubten Energiebänder für ein Teilchen, das sich in dem in Abb. 5 dargestellten periodischen Potentialfeld bewegt. Man untersuche den Grenzfall $V_0 \to \infty$, $b \to 0$ für

$$V_0 b = \text{const.}$$

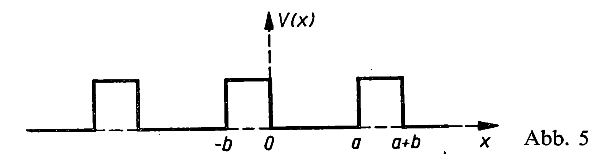


Abb. 5

1.18. Mit Hilfe der quasiklassischen Näherung sind die Energieniveaus und die Gesamtzahl der diskreten Niveaus für das Potential

$$V = -V_0 \frac{1}{\cosh^2 \frac{x}{a}}$$

zu bestimmen.

1.19. Mit Hilfe der quasiklassischen Näherung berechne man das Energiespektrum eines Teilchens in folgenden Potentialfeldern:

1.19.1. $V = \dfrac{\mu\omega^2 x^2}{2}$ (Oszillator),

1.19.2. $V = V_0 \cot^2 \dfrac{\pi}{a} x$ für $0 < x < a$.

1.20. Unter Benutzung der quasiklassischen Näherung bestimme man den Mittelwert der kinetischen Energie in einem stationären Zustand.

1.21. Mit Hilfe des Ergebnisses der vorigen Aufgabe bestimme man in der quasiklassischen Näherung die mittlere kinetische Energie eines Teilchens in folgenden Potentialfeldern:

1.21.1. $V = \dfrac{1}{2} \mu\, \omega^2 x^2$,

1.21.2. $V = V_0 \cot^2 \frac{\pi}{a} x$ für $0 < x < a$

(vgl. Aufgabe 1.19.).

1.22. Mit Hilfe des Virialsatzes ist das Energiespektrum eines Teilchens im Felde

$$V(x) = ax^\nu$$

in quasiklassischer Näherung zu berechnen.

1.23. Mit Hilfe der quasiklassischen Näherung ist die potentielle Energie $V(x)$ durch das Energiespektrum E_n auszudrücken. $V(x)$ sei eine gerade Funktion:

$$V(x) = V(-x),$$

die für $x > 0$ monoton zunimmt.

1.24. Man bestimme die Energie des gebundenen Zustandes für das Potential

$$V(x) = -q\,\delta(x).$$

2. DURCHGANG DURCH EINE POTENTIALSCHWELLE

2.1. Bei der Untersuchung der Elektronenemission durch Metalle muß man berücksichtigen, daß die Elektronen, deren Energie zum Verlassen des Metalls ausreicht, nach der Quantenmechanik an der Metallgrenze reflektiert werden können. Man betrachte ein eindimensionales Modell mit dem Potential

$$V = \begin{cases} -V_0 & \text{für } x < 0 \text{ (im Metall)}, \\ 0 & \text{für } x > 0 \text{ (außerhalb des Metalls)} \end{cases}$$

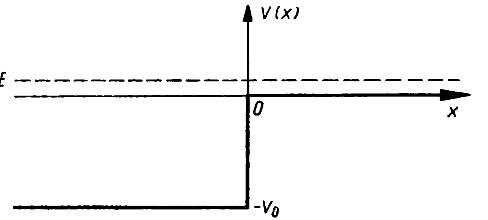


Abb. 6

(Abb. 6) und bestimme den Reflexionskoeffizienten für ein Elektron mit der Energie $E > 0$ am Metallrand.

2.2. In der vorigen Aufgabe wurde angenommen, daß sich das Potential am Metallrand sprunghaft ändert. In Wirklichkeit erfolgt die Änderung des Potentials in einem Gebiet von der Größenordnung der interatomaren

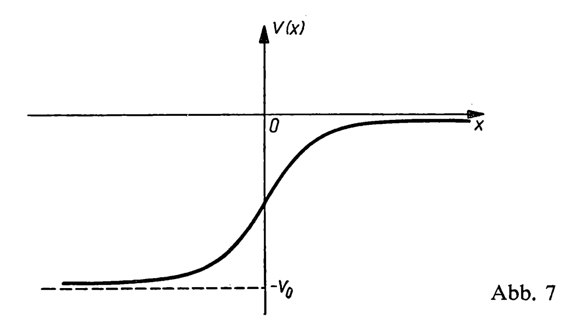


Abb. 7

Abstände im Metall jedoch stetig. Man approximiere das Potential in der Umgebung des Metallrandes durch die Funktion

$$V = -\frac{V_0}{e^{x/a} + 1}$$

(Abb. 7) und bestimme den Reflexionskoeffizienten für ein Elektron mit der Energie $E > 0$.

2.3. Man berechne die Durchlässigkeit einer rechteckigen Potentialschwelle (Abb. 8).

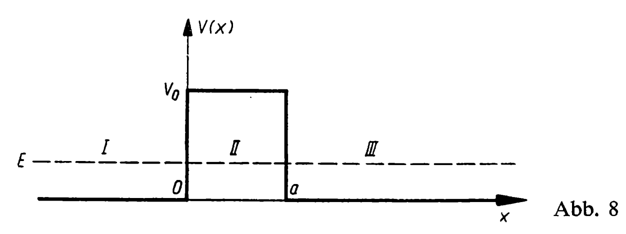


Abb. 8

2.4. Der Reflexionskoeffizient eines Teilchens mit $E > V_0$ ist für den Fall einer rechteckförmigen Schwelle zu bestimmen.

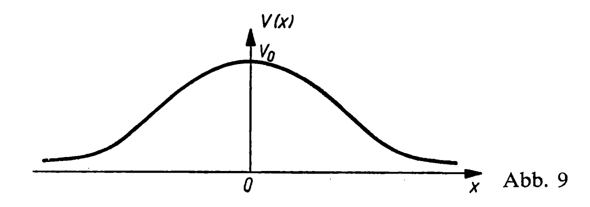


Abb. 9

2.5. Man berechne die Durchlässigkeit der Potentialschwelle

$$V(x) = \frac{V_0}{\cosh^2 \frac{x}{a}}$$

für einen Teilchenstrom mit der Energie $E < V_0$ (Abb. 9).

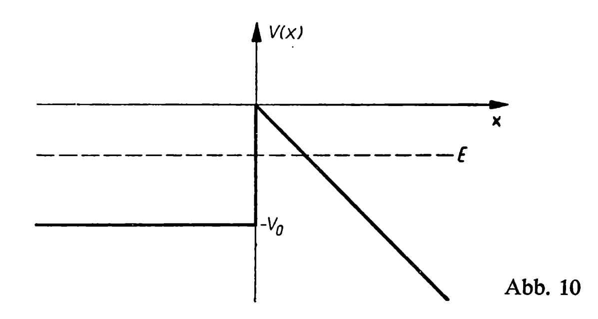


Abb. 10

2.6. Mit Hilfe der quasiklassischen Näherung ist die Durchlässigkeit von Elektronen durch die Oberfläche eines Metalls in einem starken elektrischen Feld der Feldstärke F zu bestimmen (Abb. 10). Man bestimme die Grenzen der Anwendbarkeit dieser Näherung.

2.7. In Wirklichkeit erfolgt die Änderung des Potentials in der Nähe einer Metalloberfläche kontinuierlich. So wirkt z. B. in großen Abständen von der Metalloberfläche das Potential der elektrischen Bildkraft

$$V_B = -\frac{e}{4x}.$$

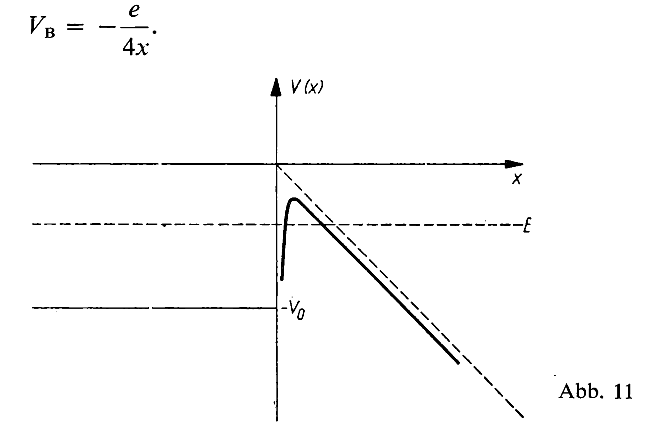


Abb. 11

Unter Berücksichtigung der Bildkraft ist die Durchlässigkeit D der Metalloberfläche in einem elektrischen Feld zu berechnen (Abb. 11).

2.8. Man berechne Näherungsausdrücke für die Energieniveaus und Wellenfunktionen eines Teilchens in einem symmetrischen Potentialfeld (Abb. 12) für $E \ll V_0$ und geringe Durchlässigkeit der Schwelle ($2\mu V_0 b^2/\hbar^2 \gg 1$).

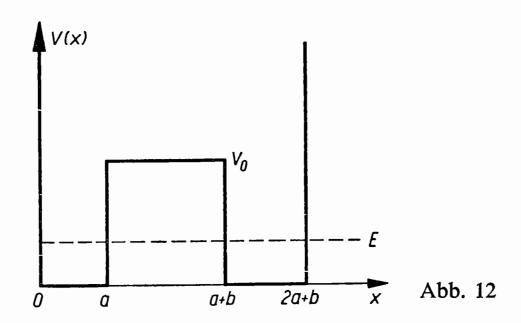


Abb. 12

2.9. Das symmetrische Feld $V(x)$ bestehe aus zwei Potentialmulden, die durch eine Schwelle voneinander getrennt seien (Abb. 13). Mit Hilfe der quasiklassischen Näherung sollen die Energieniveaus eines Teilchens be-

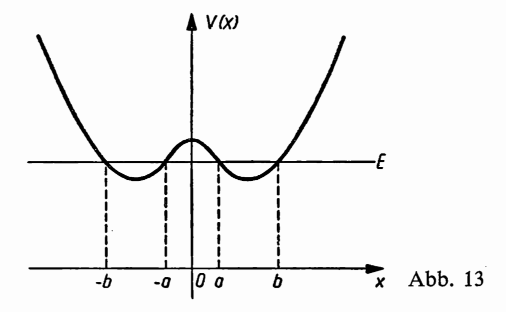


Abb. 13

rechnet werden, das sich im Feld $V(x)$ befindet. Das gefundene Energiespektrum ist mit demjenigen einer einzigen Mulde zu vergleichen. Wie groß ist die Aufspaltung der Energieniveaus einer einzelnen Mulde?

Hinweis: Vgl. Anhang I.

2.10. Zwei symmetrische Potentialmulden (vgl. Aufgabe 2.9.) seien bis zur Zeit $t = 0$ durch eine undurchdringliche Wand voneinander getrennt, und ein Teilchen befinde sich bis zu diesem Zeitpunkt auf der linken Seite der Trennwand in einem stationären Zustand. In welcher Zeit nach der Entfernung der Wand erreicht das Teilchen die rechtsseitige Mulde?

2.11. Das Potentialfeld $V(x)$ bestehe aus N identischen Potentialmulden, die durch identische Potentialschwellen voneinander getrennt seien (Abb. 14).

Unter der Annahme, daß die Bedingungen für die quasiklassische Näherung erfüllt sind, sollen die Energieniveaus für das Feld $V(x)$ bestimmt werden.

Man vergleiche das gewonnene Energiespektrum mit demjenigen einer einzelnen Mulde.

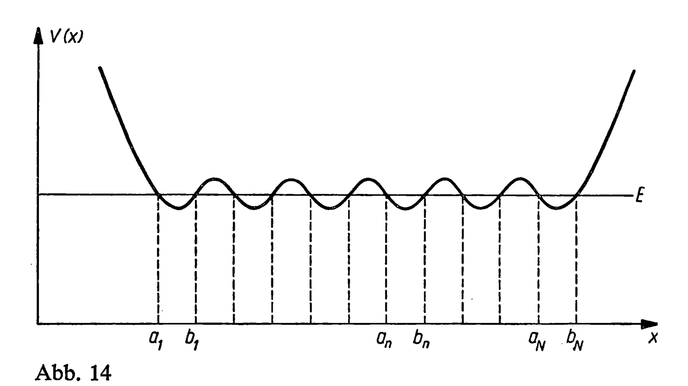


Abb. 14

2.12. Man bestimme die quasistationären Niveaus eines Teilchens, das sich in dem symmetrischen Feld der Abb. 15 befindet, mit Hilfe der quasiklassischen Näherung. Ferner ist die Durchlässigkeit $D(E)$ für Teilchen mit der Energie $E < V_0$ zu berechnen.

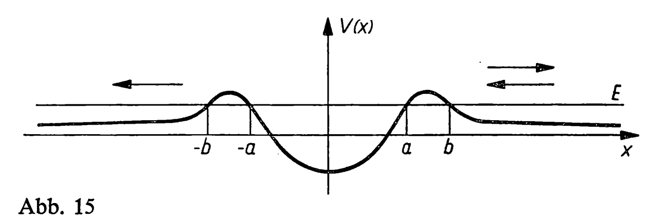


Abb. 15

2.13. Es ist die Durchlässigkeit der Potentialschwelle $V = q\,\delta(x)$ zu berechnen.

2.14. Man bestimme die quasistationären Niveaus eines Teilchens, das sich im Potentialfeld

$$V(x) = q\{\delta(x + a) + \delta(x - a)\}$$

befindet, falls die Energien der quasistationären Niveaus der Bedingung

$$E \ll \frac{\mu q^2}{\hbar^2}$$

genügen.

2.15. Die Durchlässigkeit einer Potentialschwelle der Form

$$V(x) = q\{\delta(x + a) + \delta(x - a)\}$$

ist zu berechnen.

2.16. Man betrachte ein eindimensionales Modell für die Streuung von Elektronen an einem festen Teilchen, das sich in zwei Energiezuständen befinden kann. Die Wechselwirkungskraft sei kurzreichweitig.

3. VERTAUSCHUNGSREGELN. UNSCHÄRFERELATION. ZERFLIESSEN VON WELLENPAKETEN

3.1. Es ist zu zeigen, daß für zwei hermitesche Operatoren A und B, die der Vertauschungsregel

$$AB - BA = iC$$

genügen,

$$\sqrt{\overline{(\Delta A)^2}\,\overline{(\Delta B)^2}} \geqq \frac{|\overline{C}|}{2}$$

gilt.

3.2. Man beweise, daß für zwei hermitesche Operatoren A und B

$$\overline{(A)^2}\,\overline{(B)^2} \geqq \frac{(\overline{C})^2 + (\overline{D})^2}{4}$$

mit

$$C = \frac{1}{i}(AB - BA) \quad \text{und} \quad D = AB + BA$$

gilt.

3.3. Wie lautet die Unschärferelation für die Operatoren q und $F(p)$, wenn q und p der Vertauschungsregel

$$qp - pq = i\hbar$$

genügen?

Hinweis: Die Funktion $F(p)$ ist in eine TAYLOR-Reihe zu entwickeln.

3.4. Die Energie des Grundzustandes eines Oszillators ist mit Hilfe der Unschärferelation abzuschätzen.

3.5. Man schätze die Energie eines Elektrons in der K-Schale eines Atoms mit der Ordnungszahl Z im nichtrelativistischen und relativistischen Fall ab.

3.6. Die Energie des Grundzustandes eines Zweielektronenatoms der Ordnungszahl Z ist mit Hilfe der Unschärferelation abzuschätzen.

3.7. Das von einem freien Elektron erzeugte Magnetfeld hängt sowohl von der Bewegung des Teilchens als auch von seinem magnetischen Eigenmoment ab.

Nach der Elektrodynamik ist die magnetische Feldstärke einer bewegten Ladung größenordnungsmäßig

$$H_1 \approx \frac{ev}{cr^2}$$

und die Feldstärke eines magnetischen Dipols mit dem Moment μ von der Größenordnung

$$H_2 \approx \frac{\mu}{r^3}.$$

Das magnetische Moment μ eines freien Elektrons kann durch Messung der vom Elektron erzeugten Feldstärke bestimmt werden, wenn die beiden Bedingungen

$$H_2 \gg H_1$$

und

$$\Delta r \ll r$$

erfüllt sind. Diese Bedingungen bedeuten, daß die Abmessung Δr des Gebietes, in dem das Elektron lokalisiert ist, kleiner sein muß als der Abstand zwischen diesem Gebiet und dem Punkt, in dem das Magnetfeld beobachtet wird.

Können diese beiden Bedingungen gleichzeitig erfüllt werden?

Hinweis: Man benutze die Unschärferelation und den Ausdruck $\mu = e\hbar/2mc$ für das magnetische Moment des Elektrons.

3.8. Welche physikalische Bedeutung besitzt die Größe p_0 in der Wellenfunktion

$$\psi(x) = \varphi(x) \exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar}\right),$$

wobei die Funktion $\varphi(x)$ reell ist?

3.9. Man zeige, daß der Mittelwert des Impulses in einem zum diskreten Spektrum gehörigen stationären Zustand verschwindet.

3.10. Die Wellenfunktion eines freien Teilchens sei zur Zeit $t = 0$ gegeben durch den Ausdruck

$$\psi(x, 0) = \varphi(x) \exp\left(\frac{ip_0 x}{\hbar}\right).$$

Die Funktion $\varphi(x)$ sei reell und nur für Werte von x mit $-\delta < x < +\delta$ wesentlich von Null verschieden. Für welche Werte von x wird die Wellenfunktion zur Zeit t wesentlich von Null verschieden sein?

3.11. Die Wellenfunktion eines Teilchens zur Zeit $t = 0$ sei gegeben für

3.11.1. die freie Bewegung durch

$$\psi(\mathfrak{r}, 0) = \frac{1}{(\pi\delta^2)^{3/4}} \exp\left\{\frac{i\mathfrak{p}_0\mathfrak{r}}{\hbar} - \frac{\mathfrak{r}^2}{2\delta^2}\right\},$$

3.11.2. die Bewegung in einem homogenen Feld durch

$$\psi(\mathfrak{r}, 0) = \frac{1}{(\pi\delta^2)^{3/4}} \exp\left\{\frac{i\mathfrak{p}_0\mathfrak{r}}{\hbar} - \frac{\mathfrak{r}^2}{2\delta^2}\right\},$$

3.11.3. die Bewegung eines Teilchens im Potentialfeld $V = \dfrac{\mu\omega^2}{2} x^2$ durch

$$\psi(x, 0) = c \exp\left\{\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{\alpha^2(x - x_0)^2}{2}\right\}, \quad \alpha = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2}.$$

Man diskutiere die Änderung der Wellenfunktion (das Zerfließen des Wellenpaketes) für jeden einzelnen Fall.

3.12. Man beweise die Beziehung

$$e^L a\, e^{-L} = a + [L, a] + \frac{1}{2!}[L, [L, a]] + \frac{1}{3!}[L, [L, [L, a]]] + \cdots$$

für die Operatoren L und a.

3.13. Ein Oszillator befinde sich zur Zeit $t \to -\infty$ im Grundzustand. Man bestimme die Wahrscheinlichkeit dafür, den Oszillator zur Zeit $t \to +\infty$ im n-ten angeregten Zustand vorzufinden, wenn auf ihn die Kraft $f(t)$ wirkt, wobei $f(t)$ eine beliebige Funktion der Zeit ist ($f = 0$ für $t \to \pm\infty$).

Man führe die Rechnung durch für die Fälle

3.13.1. $f(t) = f_0 \exp(-t^2/\tau^2)$,

3.13.2. $f(t) = f_0(1 + t^2/\tau^2)^{-1}$.

3.14. Man zeige, daß sich die Bestimmung der Bewegung eines Oszillators, auf den die äußere Kraft $f(t)$ wirkt, auf das einfachere Problem der Berechnung der Bewegung eines ungestörten Oszillators zurückführen läßt, wenn man die neue Variable

$$x_1 = x - \xi(t)$$

einführt, wobei $\xi(t)$ der klassischen Gleichung

$$\mu\ddot{\xi} = f(t) - \mu\omega^2\xi$$

genügt.

3.15. Man bestimme die Greensche Funktion eines Oszillators mit zeitabhängiger Eigenfrequenz, indem man sie durch die Lösung der klassischen Gleichung für einen Oszillator mit veränderlicher Frequenz ausdrückt.

3.16. Mit Hilfe der Greenschen Funktion, die in der vorigen Aufgabe berechnet wurde, ist die zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsdichte für ein Teilchen anzugeben, das sich im Potentialfeld

$$V(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \quad (\omega = \text{const})$$

bewegt. Die Wellenfunktion des Teilchens zur Zeit $t = 0$ sei

$$\psi(x, 0) = c \exp\left\{-\frac{1}{2}\alpha^2(x - x_0)^2 + \frac{i}{\hbar}p_0 x\right\}.$$

3.17. Auf einen Oszillator mit zeitabhängiger Eigenfrequenz wirke eine Störkraft $f(t)$. Man bestimme die Greensche Funktion des Oszillators.

Hinweis: Man benutze die Ergebnisse der Aufgaben 3.14. und 3.15.

3.18. Auf einen Oszillator, der sich zur Zeit $t = 0$ im n-ten Energiezustand befindet, wirke die Störkraft $f(t)$. Man bestimme die Übergangswahrscheinlichkeit in den m-ten Energiezustand und berechne den Mittelwert und die Streuung der Energie im Zeitpunkt t.

3.19. Da die Schrödinger-Gleichung bezüglich der Zeit von erster Ordnung ist, wird $\psi(t)$ eindeutig durch $\psi(0)$ bestimmt. Wir schreiben den Zusammenhang in der Form

$$\psi(t) = S(t)\,\psi(0),$$

wobei $S(t)$ ein Operator ist.

Es ist zu zeigen, daß $S(t)$

3.19.1. der Gleichung

$$i\hbar\dot{S}(t) = HS(t)$$

genügt und unitär ist, d. h. $S^+ = S^{-1}$ gilt, und

3.19.2. für zeitunabhängiges H die Form

$$S(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right)$$

besitzt.

3.20. Der Mittelwert eines Operators L zur Zeit t ist definiert durch den Ausdruck

$$\overline{L(t)} = \int \psi^*(t)\, L\psi(t)\, d\tau\,.$$

3.20.1. Man zeige, daß die Zeitabhängigkeit des Operators

$$\mathfrak{L} = S^{-1}(t)\, L\, S(t),$$

worin $S(t)$ durch die Gleichung $S(t)\,\psi(0) = \psi(t)$ definiert ist, der Bedingung

$$\int \psi^*(0)\, \mathfrak{L}\psi(0)\, d\tau = \overline{L(t)}$$

genügt.

3.20.2. Man verifiziere die Relation

$$i\hbar\dot{\mathfrak{L}} = \mathfrak{L}\mathfrak{H} - \mathfrak{H}\mathfrak{L}$$

mit

$$\mathfrak{H} = S^{-1}HS.$$

3.20.3. Man beweise, daß aus der Vertauschungsregel für die Operatoren L und M

$$LM - ML = iN$$

für die zeitabhängigen Operatoren folgt

$$\mathfrak{L}\mathfrak{M} - \mathfrak{M}\mathfrak{L} = i\mathfrak{N}$$

3.21. Man bestimme den zeitabhängigen Ortsoperator x (in der Ortsdarstellung)

3.21.1. für ein freies Teilchen, *3.21.2.* für einen Oszillator.

3.22. Mit Hilfe der Ergebnisse der vorigen Aufgabe ist die Zeitabhängigkeit der Streuung der Ortskoordinate im Fall der freien Bewegung zu berechnen.

3.23. Die Wellenfunktion eines Teilchens zur Zeit $t = 0$ sei

$$\psi(x) = \varphi(x) \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x\right),$$

wobei $\varphi(x)$ eine reelle, auf 1 normierte Funktion ist. Man bestimme die Streuung $\overline{(\Delta x)^2}$ zu einem beliebigen Zeitpunkt für die Fälle 3.21.1. und 3.21.2. und zeige, daß für einen Oszillator

$$\overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_{t=0}^2}$$

gilt, d. h., daß es für

$$\varphi(x) = c \exp\left(-\frac{\mu\omega x^2}{\hbar}\right)$$

kein Zerfließen gibt (vgl. Aufgabe 3.11.3.).

4. DREHIMPULS. SPIN

4.1. Man berechne die Darstellungen der Operatoren l_x, l_y, l_z in Kugelkoordinaten, indem man davon ausgeht, daß l_x, l_y, l_z die Operatoren einer infinitesimalen Drehung sind.

4.2. Man beweise die Vertauschungsregeln

4.2.1. $[l_i, x_k] = i\, e_{ikl}\, x_l$;

4.2.2. $[l_i, p_k] = i\, e_{ikl}\, p_l$.

Dabei ist e_{ikl} ein antisymmetrischer Tensor dritter Stufe, dessen Komponenten bei Vertauschung zweier beliebiger Indizes das umgekehrte Vorzeichen erhalten, z. B. $e_{ikl} = -e_{ilk}$, mit $e_{123} = 1$ (die Indizes 1, 2, 3 entsprechen x, y, z).

4.3. Man beweise die Vertauschungsregeln

4.3.1. $[\mathfrak{l}, (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)] = 0$,

4.3.2. $[\mathfrak{l}, (x^2 + y^2 + z^2)] = 0$.

4.4. Es ist zu zeigen, daß die Mittelwerte von l_x und l_y in einem Zustand ψ mit definiertem Wert von l_z ($l_z\psi = m\psi$) verschwinden.

Hinweis: Man berechne die Mittelwerte auf den linken und rechten Seiten der Vertauschungsregeln

$$l_y l_z - l_z l_y = i l_x,$$
$$l_z l_x - l_x l_z = i l_y$$

im Zustand ψ.

4.5. Man drücke den Operator des Drehimpulses um eine bestimmte Achse z' durch die Operatoren l_x, l_y, l_z aus.

4.6. Man beweise: Gilt für einen Zustand ψ die Gleichung $l_z\psi = m\psi$, so ist der Mittelwert des Drehimpulses um eine Achse z', welche mit der z-Achse den Winkel ϑ bildet, gleich $m \cos \vartheta$.

Dieses Resultat läßt sich physikalisch in folgender Weise interpretieren: Der Drehimpulsvektor im Zustand ψ_m ist gleichförmig über einen Kegel verteilt, dessen Achse die z-Achse ist, wobei die Länge der Mantellinie gleich $\sqrt{l(l+1)}$ und die Höhe des Kegels gleich m ist. Der Mittelwert der Projektion auf die xy-Ebene verschwindet, und die z'-Komponente ergibt sich nach der Mittelung zu $m \cos \vartheta$.

4.7. Gesucht werden die Eigenfunktionen der Operatoren des Quadrates und der z-Komponente des Bahndrehimpulses in der Impulsdarstellung.

4.8. Man bestimme das Transformationsgesetz für die Kugelfunktionen $Y_{1,1}$, $Y_{1,0}$, $Y_{1,-1}$ bei einer Drehung des Koordinatensystems um die EULERschen Winkel ϑ, ψ, φ.

Hinweis: Die Kugelfunktionen lassen sich in der Form

$$Y_{1,1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x+iy}{r}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}, \quad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x-iy}{r}$$

darstellen.

4.9. In einer Meßapparatur vom Typ der beim STERN-GERLACH-Versuch benutzten Anordnung hängt die Ablenkung der Atome, die den Gesamtdrehimpuls J besitzen, vom Wert der Drehimpulskomponente in Magnetfeldrichtung im Gerät ab. Ein Bündel, das aus Teilchen mit definiertem Drehimpuls bezüglich der Magnetfeldrichtung besteht, wird in $2J + 1$ Bündel aufgespalten.

Man bestimme die relativen Intensitäten dieser Bündel, wenn $J = 1$ ist und die Drehimpulskomponente in bezug auf eine Achse, die mit der Magnetfeldrichtung den Winkel ϑ bildet, den definierten Wert M $(+1, 0, -1)$ besitzt.

4.10. Die z-Komponente des Spins eines Elektrons sei mit Sicherheit gleich $+1/2$. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die Spinkomponente in bezug auf eine z'-Achse, die mit der z-Achse den Winkel ϑ bildet, die Werte $+1/2$ und $-1/2$ besitzt? Man bestimme den Mittelwert der z'-Komponente des Spins.

4.11. Die allgemeinste Form der Spinfunktion eines Teilchens mit dem Spin $1/2$ lautet in der „z"-Darstellung

$$\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}e^{i\alpha}\cos\delta\\ e^{i\beta}\sin\delta\end{pmatrix}.$$

Diese Funktion beschreibt den Zustand eines Teilchens, in dem die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die z-Komponente des Spins den Wert $+1/2$ (bzw. $-1/2$) besitzt, gleich $\cos^2\delta$ (bzw. $\sin^2\delta$) ist.

Wie wird das Ergebnis einer Messung der Spinkomponente bezüglich einer beliebig gerichteten Achse ausfallen?

4.12. Die Spinfunktion in der z-Darstellung lautet

$$\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}e^{i\alpha}\cos\delta\\ e^{i\beta}\sin\delta\end{pmatrix}.$$

Existiert eine Richtung im Raum, längs der die Spinkomponente mit Sicherheit gleich $+1/2$ ist?

Gibt es eine solche Richtung, so sind ihre Polarwinkel Θ und Φ anzugeben.

Hinweis: Die Winkel Θ und Φ lassen sich aus der Bedingung bestimmen, daß die zweite Komponente der Spinfunktion verschwinden muß.

4.13. Wir betrachten ein System aus nicht miteinander wechselwirkenden identischen Teilchen mit gleichen Impulsen und den Spins $1/2$. Besäßen die Teilchen keinen Spin, so könnte man von einer reinen Gesamtheit sprechen. Man weiß aber nicht, ob alle Teilchen dieselben Spinrichtungen besitzen.

Kann man an Hand eines Experiments vom Typ des Stern-Gerlach-Versuches entscheiden, ob das Teilchenbündel eine reine oder eine gemischte Gesamtheit darstellt?

4.14. Man zeige, daß der Operator, der die Komponenten der Spinfunktion bei einer Drehung um die Eulerschen Winkel ϑ, ψ und φ transformiert, die Form

$$T(\psi, \vartheta, \varphi) = \exp(i\varphi s_z)\exp(i\vartheta s_y)\exp(i\psi s_x)$$

besitzt.

4.15. Es ist zu zeigen, daß die Transformationsmatrix für die Komponenten der Spinfunktion bei einer Drehung des Koordinatensystems um den Winkel Φ um eine Achse mit den Richtungskosinus α, β, γ in der Form

$$T = \exp\left[i\Phi(\alpha s_x + \beta s_y + \gamma s_z)\right] = \cos\frac{\Phi}{2} + 2i(\alpha s_x + \beta s_y + \gamma s_z)\sin\frac{\Phi}{2}$$

dargestellt werden kann.

Hinweis: Der Zusammenhang der EUERLschen Winkel ϑ, ψ, φ mit α, β, γ und Φ ist gegeben durch

$$\cos\frac{\Phi}{2} = \cos\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{1}{2}(\varphi + \psi),$$

$$\alpha\sin\frac{\Phi}{2} = \sin\frac{\vartheta}{2}\cos\frac{1}{2}(\varphi - \psi),$$

$$\beta\sin\frac{\Phi}{2} = \sin\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{1}{2}(\varphi - \psi),$$

$$\gamma\sin\frac{\Phi}{2} = \cos\frac{\vartheta}{2}\sin\frac{1}{2}(\varphi + \psi).$$

Es ist zu beachten, daß

$$\exp\left[i\Phi(\alpha s_x + \beta s_y + \gamma s_z)\right]$$

nicht gleich

$$\exp(i\Phi\alpha s_x)\exp(i\Phi\beta s_y)\exp(i\Phi\gamma s_z)$$

ist.

4.16. Man berechne die Eigenfunktionen des Operators

$$\alpha s_x + \beta s_y + \gamma s_z$$

mit

$$\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$$

und zeige, daß die Entwicklungskoeffizienten einer beliebigen Spinfunktion $\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$ nach diesen Eigenfunktionen die Wahrscheinlichkeiten dafür angeben, daß die Werte der Spinkomponenten in bezug auf eine Achse mit den Richtungskosinus α, β, γ gleich $+{}^1/_2$ oder $-{}^1/_2$ sind.

4.17. Gesucht ist die Matrix, welche die Komponenten der Spinfunktion eines Teilchens mit dem Spin 1 bei einer beliebigen Drehung des Koordinatensystems transformiert.

4.18. Ein Teilchen besitze den Drehimpuls j und den größtmöglichen Wert der z-Komponente des Drehimpulses.

Zu berechnen sind die Wahrscheinlichkeiten für die möglichen Werte der Drehimpulskomponenten in einer Richtung, die mit der z-Achse den Winkel ϑ bildet.

4.19. Ein System mit der Gesamtdrehimpulsquantenzahl J befinde sich in dem zum Eigenwert M des Operators J_z gehörigen Zustand. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß eine Messung der Drehimpulskomponente in bezug auf die z'-Achse, welche mit der z-Achse den Winkel ϑ bildet (z. B. im STERN-GERLACH-Versuch), den Wert M' ergibt?

4.20. Man beweise den Satz: Ist $\psi_m^{(0)}$ Eigenfunktion des Operators J_z zum Eigenwert m, so ist die Funktion

$$\psi_m = \exp(-iJ_z\varphi)\exp(-iJ_y\vartheta)\,\psi_m^{(0)}$$

Eigenfunktion des Operators

$$J_\xi = J_x \sin\vartheta\cos\varphi + J_y \sin\vartheta\sin\varphi + J_z\cos\vartheta$$

zu demselben Eigenwert, d. h.

$$J_\xi\psi_m = m\psi_m.$$

Hinweis: Man benutze die Relationen

$$\exp(-iJ_y\vartheta)\,J_z\exp(iJ_y\vartheta) = J_z\cos\vartheta + J_x\sin\vartheta,$$

$$\exp(-iJ_z\varphi)\,J_x\exp(iJ_z\varphi) = J_x\cos\varphi + J_y\sin\varphi$$

(vgl. Aufgabe 3.12.).

4.21. Ein Teilchen mit dem Spin $^1/_2$ bewege sich in einem Zentralfeld. Zu bestimmen sind die Wellenfunktionen des Teilchens, die gleichzeitig Eigenfunktionen der folgenden drei miteinander vertauschbaren Operatoren sind:

$$j_z = l_z + s_z,\ \mathfrak{l}^2,\ \mathfrak{j}^2.$$

4.22. Der Zustand eines Elektrons werde durch die Quantenzahlen l, j, m charakterisiert. Mit Hilfe der Wellenfunktionen, die in der letzten Aufgabe berechnet wurden, sind die möglichen Werte der Bahndrehimpuls-

und Spinkomponenten und die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten anzugeben sowie die Mittelwerte der Komponenten zu bestimmen.

4.23. Unter der Spinrichtung verstehen wir die Richtung, in der die Spinkomponente mit Sicherheit gleich $+{}^1/_2$ ist. Wir charakterisieren diese Richtung durch die Polarwinkel Θ und Φ. Der Zustand eines Teilchens werde durch die Wellenfunktion $\psi(l, j = l \pm {}^1/_2, m)$ beschrieben (vgl. Aufgabe 4.21.). Die Spinrichtungen des Teilchens in verschiedenen Raumpunkten werden im allgemeinen voneinander verschieden sein. Man bestimme den Zusammenhang zwischen Θ, Φ und den räumlichen Koordinaten des Teilchens.

4.24. Für ein System, das aus zwei Teilchen mit den Spins ${}^1/_2$ besteht, sind die Eigenfunktionen der miteinander vertauschbaren Operatoren des Quadrates und der z-Komponente des Gesamtspins anzugeben.

4.25. Ein System bestehe aus zwei Teilchen mit den Drehimpulsquantenzahlen $l_1 = 1$ und $l_2 = l$. Die Gesamtdrehimpulsquantenzahl J kann in diesem Fall die Werte $l + 1$, l und $l - 1$ annehmen. Man drücke die Eigenfunktionen der Operatoren $\mathfrak{J}^2$ und J_z durch die Eigenfunktionen der Operatoren der Quadrate und der z-Komponenten der Drehimpulse der einzelnen Teilchen aus.

4.26. Gegeben sind zwei Teilchen mit den Drehimpulsquantenzahlen j_1 und j_2. Unter Benutzung der Eigenschaften des Operators

$$J_- = (j_{1x} + j_{2x}) - i(j_{1y} + j_{2y})$$

ist die Wellenfunktion des Systems mit dem Drehimpuls $J = j_1 + j_2$ und der z-Komponente $M = J - 1$ nach den Wellenfunktionen der beiden Teilchen zu entwickeln.

Wie sieht die Wellenfunktion des Systems mit dem Drehimpuls $J = j_1 + j_2 - 1$ und der z-Komponente $M = J$ aus?

4.27. Es ist zu zeigen, daß eine Wellenfunktion zweier Teilchen mit dem Gesamtdrehimpuls Null, wobei jedes Teilchen den Drehimpuls j besitzt, in der folgenden Form geschrieben werden kann:

$$\Psi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_{m_j=-j}^{j} (-1)^{m_j+1/2}\, \psi_j^{m_j}(1)\, \psi_j^{-m_j}(2) \qquad (j \text{ halbzahlig}),$$

$$\Psi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_{m_j=-j}^{j} (-1)^{m_j} \psi_j^{m_j}(1)\, \psi_j^{-m_j}(2) \qquad (j \text{ ganzzahlig}).$$

Hinweis: Man benutze die Eigenschaften des Operators

$$J_- = (j_{1x} + j_{2x}) - i(j_{1y} + j_{2y}).$$

4.28. Man beweise, daß

$$\Psi_{J=j}^{M=J} = \sqrt{\frac{2}{2j-1}} \sum_{m_j=1/2}^{j-1} (-1)^{m_j+1/2} \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_j^j(1) & \psi_j^{m_j}(1) & \psi_j^{-m_j}(1) \\ \psi_j^j(2) & \psi_j^{m_j}(2) & \psi_j^{-m_j}(2) \\ \psi_j^j(3) & \psi_j^{m_j}(3) & \psi_j^{-m_j}(3) \end{vmatrix}$$

Eigenfunktion des Gesamtdrehimpulses dreier Teilchen ist, die dem resultierenden Drehimpuls $J = j$ und der z-Komponente $M = J$ entspricht. Der Drehimpuls eines jeden Teilchens ist gleich j (j halbzahlig).

Hinweis: Man benutze die Eigenschaften des Operators J_+.

4.29. Wir bezeichnen mit $\vec{\sigma}_1$ und $\vec{\sigma}_2$ die Spinoperatoren zweier Teilchen und mit $\mathfrak{r}$ den Radiusvektor zwischen den Teilchen. Es ist zu beweisen, daß jede Potenz der Operatoren $(\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2)$ und $S_{12} = \frac{3(\vec{\sigma}_1\mathfrak{r})(\vec{\sigma}_2\mathfrak{r})}{r^2} - (\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2)$ mit positivem, ganzzahligem Exponenten und jedes Produkt dieser Potenzen als Linearkombination der beiden Operatoren und der Einheitsmatrix dargestellt werden kann.

4.30. Man zeige, daß sich der Operator S_{12} (vgl. die vorige Aufgabe) durch den Operator des Gesamtspins

$$\mathfrak{S} = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2)$$

ausdrücken läßt:

$$S_{12} = \frac{6(\mathfrak{S}\mathfrak{r})^2}{r^2} - 2\mathfrak{S}^2,$$

und daß man S_{12}, falls der Gesamtspin der beiden Teilchen gleich 1 ist, als dreireihige Matrix darstellen kann:

$$S_{12} = \frac{4\sqrt{\pi}}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} Y_{2,0} & -\sqrt{3}\,Y_{2,-1} & \sqrt{6}\,Y_{2,-2} \\ -\sqrt{3}\,Y_{2,1} & -2Y_{2,0} & \sqrt{3}\,Y_{2,-1} \\ \sqrt{6}\,Y_{2,2} & \sqrt{3}\,Y_{2,1} & Y_{2,0} \end{pmatrix}.$$

4.31. Es ist zu zeigen, daß sich der normierte Teil der Wellenfunktion für den $^3D_1$-Zustand, der die Winkel und die Spinvariablen enthält, in folgender Form schreiben läßt:

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} S_{12} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (J = 1, M = 1, L = 2, S = 1),$$

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} S_{12} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (J = 1, M = 0, L = 2, S = 1),$$

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} S_{12} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (J = 1, M = -1, L = 2, S = 1).$$

Hinweis: Vgl. Aufgabe 4.25.

4.32. Zwei Protonen befinden sich im Abstand a voneinander. Zu berechnen ist die Energie der Dipol-Dipol-Wechselwirkung.

4.33. Zur Zeit $t = 0$ besitze die Spinfunktion der beiden Protonen (vgl. die vorige Aufgabe) die Form $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2$. Nach welcher Zeit wird die Spinfunktion die Form $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2$ besitzen?

4.34. Man beweise die Beziehungen

4.34.1. $[\mathfrak{J}^2, \mathfrak{A}] = i(\mathfrak{A} \times \mathfrak{J} - \mathfrak{J} \times \mathfrak{A})$,

4.34.2. $[\mathfrak{J}^2, [\mathfrak{J}^2, \mathfrak{A}]] = 2(\mathfrak{J}^2\mathfrak{A} + \mathfrak{A}\mathfrak{J}^2) - 4\mathfrak{J}(\mathfrak{J}\mathfrak{A})$,

4.34.3. $(\mathfrak{A})_{nJM}^{n'JM'} = \dfrac{(\mathfrak{J}\mathfrak{A})_{nJ}^{n'J}}{J(J+1)} (\mathfrak{J})_{JM}^{JM'}$.

Dabei ist $\mathfrak{A}$ eine vektorielle physikalische Größe, die den Vertauschungsregeln

$$[J_i, A_k] = ie_{ikl}A_l$$

genügt.

4.35. Der Mittelwert des Operators

$$\vec{\mu} = g_1\mathfrak{J}_1 + g_2\mathfrak{J}_2$$

ist in dem Zustand zu berechnen, der durch die Quantenzahlen J, M_J, J_1, J_2 charakterisiert ist, wenn $\mathfrak{J} = \mathfrak{J}_1 + \mathfrak{J}_2$ der Operator des Gesamtdrehimpulses ist.

Hinweis: Man benutze die in der vorigen Aufgabe angegebene Formel.

4.36. Man berechne das magnetische Moment des Kerns ^{15}N (in Kernmagnetonen), in dem für die Auffüllung der Schale ein Proton im Zustand $p_{1/2}$ erforderlich ist. Das magnetische Moment eines freien Protons ist $\mu_p = 2{,}79$.

4.37. Zu berechnen ist das magnetische Moment des Kerns ^{17}O, der neben einer abgeschlossenen Schale ein Neutron im Zustand $d_{5/2}$ enthält. Das magnetische Moment eines freien Neutrons ist $\mu_n = -1{,}91$.

4.38. Welche Zahlenwerte erhielte man für das magnetische Moment des Deuterons, wenn sich das Deuteron im Zustand

4.38.1. $^3S_1$; *4.38.2.* $^1P_1$; *4.38.3.* $^3P_1$; *4.38.4.* $^3D_1$
befände?

4.39. Unter der Annahme, daß der Grundzustand des Deuterons eine Superposition der Zustände $^3S_1$ und $^3D_1$ darstellt, ist das Gewicht der D-Welle für $\mu_p = 2{,}78$, $\mu_n = -1{,}91$ und $\mu_d = 0{,}85$ zu berechnen.

4.40. Das Quadrupolmoment des Deuterons ist unter der Annahme, daß sich das Deuteron im Zustand

4.40.1. $^1P_1$; *4.40.2.* $^3P_1$
befindet, durch den Mittelwert des Abstandsquadrats auszudrücken.

4.41. Ein Kern bestehe aus einem „Rumpf" und einem äußeren Proton. Ohne Wechselwirkung mit dem äußeren Proton ist der Rumpf kugelsymmetrisch und sein Quadrupolmoment gleich Null.

Unter Vernachlässigung der Deformation des Rumpfes durch das äußere Proton ist das Quadrupolmoment des Kerns zu bestimmen. Die Drehimpulsquantenzahl des äußeren Protons sei gleich j.

4.42. Die vorige Aufgabe ist unter sonst gleichen Annahmen für den Fall zu lösen, daß drei äußere Protonen vorhanden sind. Die radialen Wellenfunktionen der äußeren Protonen sind identisch. Die Drehimpulse jedes Protons sowie des ganzen Kerns seien gleich j.

4.43. Man bestimme die Quadrupolenergie eines Kerns, der sich in einem äußeren inhomogenen elektrischen Feld befindet, für folgende Werte des Kernspins:

4.43.1. $I = 1$, *4.43.2.* $I = 3/2$, *4.43.3.* $I = 2$.

Das Quadrupolmoment des Kerns sei Q_0.

4.44. Mit Hilfe des Ausdrucks für die Matrixelemente eines Vektors (siehe LANDAU und LIFSCHIZ, Quantenmechanik) ist zu beweisen, daß das Quadrupolmoment eines Kerns mit der Ordnungszahl Z

$$Q = I(2I-1)\sum_{i=1}^{Z}\sum_{n'}\{2(I+1)\,|(z_i)^{n,I}_{n',\,I+1}|^2 - 2I|(z_i)^{n,I}_{n',\,I-1}|^2\}$$

ist, wobei die Summe über alle Protonen zu erstrecken ist. I ist der Kernspin, und n bezeichnet die Gesamtheit der übrigen Quantenzahlen, die den Zustand charakterisieren.

4.45. Wir bezeichnen die Spinvariable des i-ten Elektrons mit σ_l. Diese Variable kann die beiden Werte $+1$ und -1 annehmen. Man zeige, daß die Operatoren

$$\sigma_{lx} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_l, \quad \sigma_{ly} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}_l, \quad \sigma_{lz} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_l$$

des l-ten Elektrons wie folgt auf die Spinfunktion $f(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_l, \ldots, \sigma_n)$ der Spinvariablen von n Elektronen wirken:

$$\sigma_{lx}f = f(\sigma_1, \ldots, \sigma_{l-1}, -\sigma_l, \sigma_{l+1}, \ldots, \sigma_n),$$

$$\sigma_{ly}f = -i\sigma_l f(\sigma_1, \ldots, \sigma_{l-1}, -\sigma_l, \sigma_{l+1}, \ldots, \sigma_n),$$

$$\sigma_{lz}f = \sigma_l f(\sigma_1, \ldots, \sigma_{l-1}, \sigma_l, \sigma_{l+1}, \ldots, \sigma_n).$$

4.46. Mit Hilfe der Ergebnisse der vorigen Aufgabe ist zu zeigen, daß sich der Operator des Quadrates des Gesamtspins der n Elektronen in der Form

$$\mathfrak{S}^2 = n - \frac{n^2}{4} + \sum_{k<l} P_{kl}$$

schreiben läßt. Dabei ist P_{kl} ein Operator, der die Spinvariablen σ_k und σ_l vertauscht, d. h.

$$P_{kl}f(\sigma_1, \ldots, \sigma_{k-1}, \sigma_k, \sigma_{k+1}, \ldots, \sigma_{l-1}, \sigma_l, \sigma_{l+1}, \ldots, \sigma_n)$$
$$= f(\sigma_1, \ldots, \sigma_{k-1}, \sigma_l, \sigma_{k+1}, \ldots, \sigma_{l-1}, \sigma_k, \sigma_{l+1}, \ldots, \sigma_n).$$

4.47. Der HAMILTON-Operator eines aus zwei Teilchen mit den Spins $^1/_2$ bestehenden Systems sei in den Spins symmetrisch. Man zeige, daß der Betrag des Gesamtspins $\mathfrak{S}$ eine Konstante der Bewegung ist.

4.48. Ein System bestehe aus zwei Teilchen. Der Spin des einen Teilchens sei gleich $^1/_2$, der Spin des anderen gleich Null. Man beweise, daß der Bahndrehimpuls bei beliebiger Wechselwirkung zwischen den Teilchen eine Konstante der Bewegung ist.

4.49. Ein angeregter Kern A mit dem Spin 1 befinde sich in einem geraden Zustand. Die Reaktion

$$A \to B + \alpha$$

(Emission eines α-Teilchens) sei energetisch möglich. Der bei dieser Reaktion entstehende stabile Kern B soll den Spin Null besitzen und sich ebenfalls in einem geraden Zustand befinden. Es ist zu zeigen, daß diese Reaktion aus Gründen der Drehimpuls- und Paritätserhaltung verboten ist.

4.50. Man zeige, daß die Bahndrehimpulsquantenzahl L der Relativbewegung zweier α-Teilchen immer geradzahlig ist ($L = 0, 2, 4, \ldots$).

4.51. Kann der angeregte Kern $^{8}_{4}Be$ mit dem Spin 1 in zwei α-Teilchen zerfallen?

4.52. Wir nehmen an, daß der einzige gebundene Zustand des Neutron-Proton-Systems (n,p) gerade, der Gesamtspin in diesem Zustand gleich 1 und die Kräfte der (n,n)- und (n,p)-Wechselwirkung einander gleich sind. Es ist zu zeigen, daß zwei Neutronen kein gebundenes System bilden können.

4.53. Der Kern $^{6}_{2}He$ besitzt zwei Neutronen im $1p_{3/2}$-Niveau. Mit Hilfe des PAULI-Prinzips sind die möglichen Werte des Gesamtdrehimpulses dieser Neutronen zu bestimmen.

5. ZENTRALFELD

5.1. Ein Teilchen bewege sich in einem Zentralfeld. Die Gleichung für die radiale Wellenfunktion R_{nl} ist in der Form einer SCHRÖDINGER-Gleichung für die eindimensionale Bewegung darzustellen.

5.2. Die radiale Wellenfunktion eines Teilchens im Zentralfeld ist mit Hilfe der quasiklassischen Näherung zu bestimmen.

5.3. Gegeben sei ein Zentralfeld, in dem ein diskretes Energiespektrum existiert. Man beweise, daß der zu einer bestimmten Drehimpulsquantenzahl l gehörige kleinste Energiewert mit zunehmendem l größer wird.

5.4. Ein System bestehe aus zwei Teilchen mit den Massen μ_1 und μ_2. Die Operatoren des gesamten Bahndrehimpulses $\mathfrak{l}_1 + \mathfrak{l}_2$ und des Gesamtimpulses $\mathfrak{p}_1 + \mathfrak{p}_2$ sind durch die Koordinaten des Massenmittelpunktes

$\mathfrak{R} = (\mu_1 \mathfrak{r}_1 + \mu_2 \mathfrak{r}_2)/(\mu_1 + \mu_2)$ und des gegenseitigen Abstandes $\mathfrak{r} = \mathfrak{r}_2 - \mathfrak{r}_1$ auszudrücken. Man zeige, daß sich der HAMILTON-Operator in der Form

$$H = -\frac{\hbar^2}{2(\mu_1 + \mu_2)} \Delta_R - \frac{\hbar^2(\mu_1 + \mu_2)}{2\mu_1 \mu_2} \Delta_r + U(r)$$

schreiben läßt, wenn die potentielle Energie der Wechselwirkung eine Funktion des Teilchenabstandes ist:

$$U = U(|\mathfrak{r}_2 - \mathfrak{r}_1|).$$

Dabei sind Δ_R und Δ_r LAPLACE-Operatoren, die auf die Vektoren $\mathfrak{R}$ und $\mathfrak{r}$ wirken.

5.5. Man bestimme die Wellenfunktionen und Energieniveaus des dreidimensionalen isotropen Oszillators.

5.6. Die vorige Aufgabe ist durch Separation der Variablen in kartesischen Koordinaten zu lösen. Man stelle die Wellenfunktionen für $n_r = 0$, $l = 1$ (vgl. die vorige Aufgabe) als Linearkombination der gewonnenen Wellenfunktionen dar.

5.7. Unter der Annahme, daß sich ein Nukleon in einem Kern im mittleren Potentialfeld

$$U(r) = -U_0 + \frac{\mu\omega^2}{2} r^2$$

bewegt, ist die Zahl der Teilchen einer Sorte (Neutronen oder Protonen) in den abgeschlossenen Schalen zu bestimmen. Unter einer Schale verstehen wir die Gesamtheit aller Zustände mit der gleichen Energie.

5.8. Man berechne die theoretischen Radien der Kerne $^4_2$He und $^{16}_8$O, die abgeschlossene Schalen besitzen, mit Hilfe des in der letzten Aufgabe angegebenen Potentials. Unter dem theoretischen Kernradius ist der Abstand zwischen dem Massenmittelpunkt des Kerns und dem Punkt zu verstehen, in dem die „Kerndichte“

$$\varrho(\mathfrak{r}) = \sum_\nu \psi_\nu^*(\mathfrak{r}) \, \psi_\nu(\mathfrak{r})$$

(summiert wird über alle Nukleonen) am stärksten abfällt, d. h.

$$\left(\frac{d^2\varrho}{dr^2}\right)_{r=R} = 0.$$

5.9. Die Wechselwirkung zwischen einem Proton und einem Neutron kann näherungsweise durch das Potential

$$U(r) = -A \exp(-r/a)$$

beschrieben werden. Man berechne die Wellenfunktion des Grundzustandes ($l = 0$) und die Beziehung zwischen der Topftiefe A und der Größe a, welche die Reichweite der Kräfte charakterisiert, unter Benutzung der empirischen Bindungsenergie des Deuterons $E = -2{,}2$ MeV.

5.10. Mit Hilfe des RITZschen Variationsprinzips ist näherungsweise die Energie des Grundzustandes des Deuterons mit dem Potential

$$U(r) = -A \exp(-r/a)$$

zu bestimmen ($A = 32$ MeV, $a = 2{,}2 \cdot 10^{-13}$ cm). Die von dem Parameter α abhängigen radialen Wellenfunktionen sind in der Form

$$R = c \exp(-\alpha r/2a)$$

anzusetzen. Die Größe c ist mit α durch die Normierungsbedingung

$$\int_0^\infty R^2 r^2 dr = 1$$

verknüpft.

5.11. Man bestimme die Energieniveaus und Wellenfunktionen eines Teilchens, das sich im kugelförmigen „Potentialkasten"

$$U(r) = \begin{cases} 0 & \text{für } r < a, \\ \infty & \text{für } r > a \end{cases}$$

befindet. Man betrachte den Fall $l = 0$.

5.12. Man berechne das diskrete Energiespektrum eines Teilchens mit dem Drehimpuls $l = 0$ im kugelsymmetrischen Potentialtopf

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{für } r < a, \\ 0 & \text{für } r > a. \end{cases}$$

5.13. Mit Hilfe der Störungstheorie ist qualitativ die Änderung der Energieniveaus zu diskutieren, die beim Übergang vom Potential

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{für } r < a, \\ 0 & \text{für } r > a \end{cases}$$

zu dem in der Abb. 16 dargestellten Potential erfolgt.

5.14. Die potentielle Energie eines α-Teilchens im Felde eines Kerns besteht aus zwei Anteilen, der abstoßenden COULOMB-Kraft und der kurzreichweitigen anziehenden Kernkraft. Abb. 17 zeigt schematisch die Form

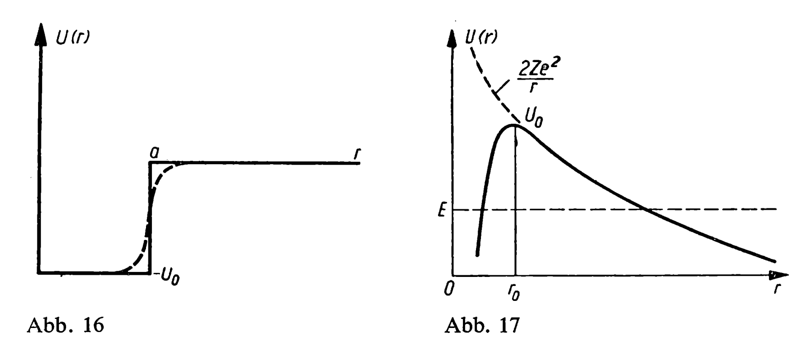


Abb. 16 Abb. 17

der potentiellen Energie. Die Emission eines α-Teilchens stellt einen spezifischen Quanteneffekt dar, welcher in der Durchlässigkeit der Potentialschwelle begründet ist. Man diskutiere den Durchgang eines α-Teilchens (mit dem Drehimpuls $l = 0$) durch die kugelsymmetrische Potentialschwelle von der vereinfachten Form

$$U(r) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad r < r_1, \\ U_0 & \text{für} \quad r_1 < r < r_2, \\ 0 & \text{für} \quad r > r_2. \end{cases}$$

Wie lautet die Beziehung zwischen Zerfallszeit und Energie?

6. BEWEGUNG EINES TEILCHENS IM MAGNETFELD

6.1. Die Wellenfunktion eines Elektrons besitze zur Anfangszeit $t = 0$ die Form

$$\Psi(x, y, z, 0) = \psi(x, y, 0)\, \varphi(z, 0).$$

In einem homogenen Magnetfeld $\mathfrak{H}$ in z-Richtung hat die Wellenfunktion zur Zeit $t > 0$ ebenfalls die Form eines Produktes:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, t)\, \varphi(z, t),$$

da die Variable z in der SCHRÖDINGER-Gleichung absepariert werden kann. Man zeige, daß die Funktion $\psi(x, y, T)$ – abgesehen von einem willkürlichen Phasenfaktor – ihren Anfangswert annimmt, wenn T die Periode der klassischen Bewegung des Teilchens im Magnetfeld ist.

6.2. Man zeige, daß die Operatoren der Geschwindigkeitskomponenten in Anwesenheit eines Magnetfeldes den folgenden Vertauschungsregeln genügen:

$$v_x v_y - v_y v_x = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} H_z,$$

$$v_y v_z - v_z v_y = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} H_x,$$

$$v_z v_x - v_x v_z = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} H_y.$$

6.3. Mit Hilfe der Ergebnisse der Aufgaben 6.2. und 1.6. ist die Energie eines geladenen Teilchens in einem homogenen Magnetfeld zu berechnen.

6.4. Man bestimme das Energiespektrum eines geladenen Teilchens, das sich in einem homogenen elektrischen und einem homogenen Magnetfeld bewegt, deren Feldstärken aufeinander senkrecht stehen.

6.5. Man berechne die Wellenfunktionen eines geladenen Teilchens, das sich in einem homogenen elektrischen Feld und einem zu diesem senkrechten homogenen Magnetfeld bewegt.

6.6. Ein geladenes Teilchen bewege sich in einem homogenen Magnetfeld, dem das Zentralfeld

$$U(r) = \frac{1}{2} \mu\omega^2 r^2$$

überlagert ist. Das Energiespektrum des Teilchens ist zu berechnen.

6.7. Man bestimme die Zeitabhängigkeit der Ortsoperatoren x und y eines geladenen Teilchens, das sich in einem homogenen Magnetfeld bewegt. Das Vektorpotential sei gegeben durch

$$A_x = -\frac{H}{2} y, \quad A_y = \frac{H}{2} x, \quad A_z = 0.$$

Wie lauten $\overline{(x - \bar{x})^2}$ und $\overline{(y - \bar{y})^2}$ als Funktionen der Zeit?

6.8. Die Energieniveaus und Wellenfunktionen eines geladenen Teilchens, das sich in einem konstanten Magnetfeld bewegt, sind zu bestimmen. Man benutze Zylinderkoordinaten und setze das Vektorpotential in der Form

$$A_\varphi = \frac{H}{2} \varrho, \quad A_\varrho = A_z = 0$$

an.

6.9. Gesucht werden die Komponenten der Stromdichte eines geladenen Teilchens, das sich in einem homogenen Magnetfeld befindet, für einen Zustand mit den Quantenzahlen n, m, k_z (vgl. die vorige Aufgabe).

6.10. Mit Hilfe der quasiklassischen Näherung sind die Energieniveaus eines geladenen Teilchens in einem homogenen Magnetfeld zu berechnen (Zylinderkoordinaten).

6.11. Man bestimme den klassisch erlaubten Bereich der radialen Bewegung in einem Magnetfeld (vgl. die vorige Aufgabe).

6.12. Die minimale „Verschmierung" der Bahn eines geladenen Teilchens in einem Magnetfeld in radialer Richtung ist abzuschätzen.

6.13. Die Lage des Mittelpunktes des Kreises, auf dem sich ein geladenes Teilchen in einem homogenen Magnetfeld bewegt, ist mit Hilfe der klassischen Mechanik durch die Ortskoordinaten x, y und die verallgemeinerten Impulse p_x, p_y auszudrücken. In den erhaltenen Beziehungen sind die Ortskoordinaten und Impulse als Operatoren aufzufassen und die Vertauschungsregeln für die eingeführten Koordinaten des „Bahnzentrums" sowie die entsprechenden Unschärferelationen anzugeben. Man zeige, daß die Summe der Quadrate der Koordinaten des „Bahnzentrums" die diskreten Werte

$$\frac{2\hbar\, c}{|e|\, H}\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

annimmt.

6.14. Man zeige, daß die Wellenfunktion eines Teilchens mit Spin, das sich in einem zeitlich veränderlichen Magnetfeld befindet, in das Produkt der Koordinaten- und Spinfunktion separiert werden kann.

6.15. Ein Teilchen mit dem Spin $^1/_2$ bewege sich in einem zeitabhängigen homogenen Magnetfeld, das die Richtung der z-Achse hat. Die Zeitabhängigkeit des Absolutbetrages der Feldstärke sei durch eine willkürliche Funktion gegeben ($H_z = H(t)$). Im Anfangszeitpunkt $t = 0$ besitzt die Spinfunktion die Form

$$\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-i\alpha} \cos\delta \\ \mathrm{e}^{+i\alpha} \sin\delta \end{pmatrix}.$$

Man bestimme die Mittelwerte der x- und y-Komponenten des Spins sowie die Richtung, in der die Spinkomponente zur Zeit t einen definierten Wert besitzt.

6.16. Im Gebiet $x > 0$ sei das homogene Magnetfeld

$$H_x = H_y = 0, \quad H_z = H$$

vorhanden, und im Gebiet $x < 0$ sei $\mathfrak{H} = 0$. Aus dem feldfreien Gebiet treffe ein Bündel polarisierter Neutronen mit dem Impuls $\mathfrak{p}$ auf die Trennebene ($x = 0$) auf. Man bestimme den Reflexionskoeffizienten für die Neutronen an der Trennebene.

6.17. Ein Teilchen mit dem Spin $^1/_2$ bewege sich in einem homogenen Magnetfeld. Die Feldstärke habe einen konstanten Betrag und ändere ihre Richtung gemäß

$$H_x = H \sin\vartheta \cos\omega\, t, \; H_y = H \sin\vartheta \sin\omega\, t, \; H_z = H \cos\vartheta.$$

Zur Zeit $t = 0$ habe die Spinkomponente in Magnetfeldrichtung den Wert $+^1/_2$. Wie groß ist die Übergangswahrscheinlichkeit des Teilchens zur Zeit t in einen Zustand, in welchem die Spinkomponente in Magnetfeldrichtung den Wert $-^1/_2$ hat?

6.18. Ein Teilchen mit dem Spin $^1/_2$ und dem magnetischen Moment μ bewege sich in dem inhomogenen Magnetfeld

$$H_z = H_0 + kz, \; H_y = -ky, \; H_x = 0 \; (\operatorname{div} \mathfrak{H} = 0).$$

6.18.1. Man bestimme die Zeitabhängigkeit der Ortsoperatoren $x(t)$, $y(t)$, $z(t)$.

6.18.2. Man bestimme die Mittelwerte der Ortskoordinaten und die Zeitabhängigkeit der Streuung der Ortskoordinaten, wenn die Wellenfunktion des Teilchens zur Zeit $t = 0$ folgende Form besitzt:

$$\psi = \varphi(x, y, z) \exp\left(i\frac{p_0 x}{\hbar}\right)\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}.$$

6.19. Ein neutrales Teilchen bewege sich in einem homogenen Magnetfeld von konstantem Betrag und zeitlich veränderlicher Richtung.

Man leite die Gleichung für die Spinfunktion in der ξ-Darstellung ab, wobei die ξ-Achse die Richtung des Magnetfeldes besitzt. Es ist zu zeigen, daß sich die Wahrscheinlichkeiten für bestimmte Werte der Drehimpulskomponenten in Magnetfeldrichtung bei genügend schwacher Änderung der Magnetfeldrichtung nicht ändern.

6.20. Zwei Protonen im gegenseitigen Abstand a befinden sich in einem Magnetfeld. Die magnetische Feldstärke $\mathfrak{H}$ bilde mit der Verbindungsgeraden zwischen den Protonen den Winkel ϑ.

Man berechne die Energieniveaus, indem man die Dipol-Dipol-Wechselwirkung als Störung auffaßt.

6.21. Der Operator der magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung von Kernen besitzt die Form

$$H = \sum_{j>k} \frac{g_j g_k}{r_{jk}^3} \beta^2 \{\mathfrak{J}_j \mathfrak{J}_k - 3(\mathfrak{J}_j \mathfrak{r}_{jk})(\mathfrak{J}_k \mathfrak{r}_{jk}) r_{jk}^{-2}\}.$$

Dabei sind $\mathfrak{r}_{jk}$ der Radiusvektor, der vom j-ten zum k-ten Kern führt, $\mathfrak{J}_j$ der Spinoperator und $g_j \beta \mathfrak{J}_j$ der Operator des magnetischen Momentes des j-ten Kerns.

Man zeige, daß die Diagonalelemente $(m|H|m)$ (m ist die z-Komponente des Gesamtspins aller Kerne) gleich den Diagonalelementen des Operators H_{eff} sind, wobei

$$H_{\text{eff}} = \sum_{j>k} A_{jk} \{\mathfrak{J}_j \mathfrak{J}_k - 3 I_{zj} I_{zk}\}$$

ist, d. h.

$$(m\,|H|\,m) = (m\,|H_{\text{eff}}|\,m).$$

Dabei gilt

$$A_{jk} = \frac{1}{2} g_j g_k \beta^2 r_{jk}^{-3} (3 \cos \vartheta_{jk} - 1),$$

worin ϑ_{jk} den Winkel angibt, den die Verbindungsgerade zwischen dem j-ten und dem k-ten Kern mit der z-Achse bildet.

Hinweis: Man drücke die Operatoren I_{xj} und I_{yj} durch die Operatoren

$$I_{+j} = I_{xj} + i I_{yj},$$
$$I_{-j} = I_{xj} - i I_{yj}$$

aus.

6.22. Drei ähnliche Kerne mit den Spins $^1/_2$ sind starr im Raum fixiert und befinden sich in einem homogenen Magnetfeld. Man bestimme die Energieniveaus dieses Systems, indem man die Dipol-Dipol-Wechselwirkungen zwischen den Kernen als kleine Störung auffaßt.

6.23. Ein Kern mit dem Spin I und dem Quadrupolmoment Q_0 befinde sich in einem Magnetfeld mit der Feldstärke $\mathfrak{H}$ und in einem inhomogenen elektrischen Feld. Man fasse den Operator der Quadrupolenergie als kleine Störung auf und bestimme die Energieniveaus des Kerns im äußeren Feld in zweiter Näherung.

7. ATOM

7.1. Aus der Ungleichung

$$\int |\nabla \psi + Z\psi \nabla r|^2 \, d\tau \geqq 0$$

sind das Minimum der Energie eines Einelektronenatoms und die dieser Energie entsprechende Wellenfunktion zu bestimmen. Man beweise, daß für den Grundzustand des Atoms gilt

$$2\bar{T} \geqq |\bar{v}|.$$

7.2. Ein Elektron befinde sich im COULOMB-Feld eines Kerns mit der Ladung Z im Grundzustand. Man zeige, daß das infolge der Wechselwirkung zwischen Kern und Elektron entstehende mittlere elektrostatische Potential

$$\varphi = \frac{e(Z-1)}{r} + e\left(\frac{Z}{a} + \frac{1}{r}\right) e^{-\frac{2Zr}{a}}, \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

ist.

7.3. Man zeige, daß im Grundzustand des Wasserstoffatoms

7.3.1. der wahrscheinlichste Wert von r gleich $a = \dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$,

7.3.2. der Mittelwert $\overline{1/r}$ gleich $1/a$ und

7.3.3. der Mittelwert $\overline{1/r^2}$ gleich $2/a^2$ ist.

7.4. Die Wellenfunktion $\psi(\mathfrak{r})$ beschreibe die Relativbewegung zweier Teilchen, eines Protons und eines Elektrons. Die Koordinaten des Massenmittelpunktes des Wasserstoffatoms seien gegeben durch

$$X = 0, \quad Y = 0, \quad Z = 0.$$

Man zeige, daß für die Wahrscheinlichkeitsdichte des Protons

$$w(\mathfrak{r}) = \left(\frac{m+M}{m}\right)^3 \left|\psi\left(\frac{m+M}{m}\mathfrak{r}\right)\right|^2$$

folgt, wobei m und M die Masse des Elektrons bzw. des Protons bedeuten.

7.5. Wie sehen die Impulsverteilungen des Elektrons im Wasserstoffatom in den $1s$-, $2s$- und $2p$-Zuständen aus?

7.6. Zu berechnen ist das mittlere Schwankungsquadrat $\overline{r^2} - \bar{r}^2$ des Abstandes des Elektrons vom Kern im Wasserstoffatom für den durch die Quantenzahlen n und l charakterisierten Zustand.

7.7. Mit Hilfe der Wellenfunktionen in Kugelkoordinaten drücke man die Wasserstoffeigenfunktion für $n_1 = 1$, $n_2 = 0$, $m = 0$ in parabolischen Koordinaten aus. Man beweise ferner die Beziehung

$$\psi_{n_1=0,\, n_2=0,\, m=n-1}(\xi, \eta, \varphi) = \psi_{n, l=n-1,\, m=n-1}(r, \vartheta, \varphi).$$

7.8. Man zeige direkt, daß sich der Entartungsgrad des n-ten Energieeigenwertes des Wasserstoffatoms bei der Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung in parabolischen Koordinaten zu n^2 ergibt.

7.9. Man bestimme die Korrektion zu den Energieniveaus des Wasserstoffatoms, die aus der relativistischen Abhängigkeit der Masse von der Geschwindigkeit resultiert (der Term von der Ordnung v^2/c^2 ist zu berücksichtigen).

7.10. Aus der relativistischen Gleichung des Elektrons (DIRAC-Gleichung) folgt, daß der HAMILTON-Operator neben der Korrektion, welche durch die relativistische Geschwindigkeitsabhängigkeit der Masse ($\sim v^2/c^2$) zustande kommt, den Term

$$H_2 = \frac{\hbar^2}{2\mu^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \mathfrak{l}\mathfrak{s}$$

enthält, wobei $\mathfrak{l}$ den Bahndrehimpulsoperator, $\mathfrak{s}$ den Spinoperator und $U(r)$ die potentielle Energie des Elektrons bedeuten (das Potential wird als kugelsymmetrisch vorausgesetzt). Dieser Term kann physikalisch in der folgenden Weise interpretiert werden: Infolge der Bewegung des magnetischen Momentes $\vec{\mu}$ (das mit dem Spin des Elektrons verknüpft ist) entsteht das elektrische Dipolmoment

$$\mathfrak{d} = \frac{1}{c} \mathfrak{r} \times \vec{\mu},$$

das mit dem Kernfeld in Wechselwirkung steht. Man bestimme die von dem Term H_2 (der sogenannten Spin-Bahn-Kopplung) herrührende Korrektion zu den Energieniveaus des Wasserstoffatoms.

7.11. Man zeige, daß das Quadrupolmoment des Wasserstoffatoms durch

$$Q_0 = -\frac{j - \frac{1}{2}}{j + 1} \overline{r^2}, \quad \overline{r^2} = \frac{n^2}{2} (5n^2 + 1 - 3l(l+1)) \left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)^2$$

gegeben ist.

7.12. Zu bestimmen ist die Gesamtwahrscheinlichkeit für die Anregung und Ionisation des Tritiumatoms ^3H beim β-Zerfall. Ferner berechne man die Anregungswahrscheinlichkeit für das n-te Niveau.

7.13. Mit Hilfe der Variationsmethode ist die Energie des Grundzustandes eines Zweielektronensystems im Felde eines Kerns mit der Ladung Z zu berechnen. Als Vergleichsfunktion ist das Produkt der Wasserstoffunktionen mit einer effektiven Ladung Z' zu wählen. Relativistische Korrektionen sollen vernachlässigt werden.

7.14. Die Wellenfunktion eines Heliumatoms kann mit genügender Genauigkeit in der Form

$$\psi = \frac{Z'^3}{\pi a^3} e^{-\frac{Z'(r_1+r_2)}{a}}, \quad Z' = \frac{27}{16}$$

geschrieben werden (vgl. Aufgabe 7.13.). Man zeige, daß das vom Atom erzeugte elektrostatische Potential gleich

$$\varphi(r) = 2e\left(\frac{1}{r} + \frac{Z'}{a}\right) e^{-\frac{2Z'r}{a}}$$

ist.

7.15. Mit Hilfe der approximierten Wellenfunktion für den Grundzustand des Heliums (vgl. Aufgabe 7.13.) ist die diamagnetische Suszeptibilität des Heliums zu berechnen.

7.16. Unter Berücksichtigung der Austauscheffekte ist die Energie des Grundzustandes für das Lithiumatom anzugeben. Als Eigenfunktionen der Elektronen wähle man die Wasserstoffunktionen für ein Elektron im $1s$-Zustand in der Form

$$\psi_{100} = 2Z_1^{3/2} e^{-Z_1 r}$$

und für ein Elektron im $2s$-Zustand in der Form

$$\psi_{200} = cZ_2^{3/2} e^{-\frac{Z_2 r}{2}} (1 - \gamma Z_2 r).$$

Dabei sind Z_1 und Z_2 Variationsparameter, c wird aus der Normierungsbedingung für die Wellenfunktion ψ_{200} bestimmt, und γ ergibt sich aus der Orthogonalität der Funktionen ψ_{100} und ψ_{200}. Bei der Lösung des Problems mit Hilfe der gewöhnlichen Störungstheorie setzt man $Z_1 = Z_2 = 3$. Durch die Einführung der Parameter Z_1 und Z_2 werden die abschirmenden Eigenschaften der Elektronen berücksichtigt.

7.17. Man bestimme die Verschiebung der Energieniveaus eines Atoms, die infolge der Kernbewegung entsteht. Man berechne die Verschiebung im Falle eines Heliumatoms für den Triplett- und Singulettzustand $1snp$, indem man als Eigenfunktionen die wasserstoffähnlichen Funktionen der einzelnen Elektronen mit einer effektiven Ladung benutzt.

7.18. Die potentielle Energie $U(x, y, z)$ sei eine in den Koordinaten homogene Funktion vom Grade ν:

$$U(\lambda x, \lambda y, \lambda z) = \lambda^\nu U(x, y, z).$$

Es ist zu zeigen, daß der Mittelwert der kinetischen Energie in einem Zustand, der zum diskreten Spektrum gehört, mit dem Mittelwert der potentiellen Energie durch die Beziehung

$$2\bar{T} = \nu \bar{U}$$

verknüpft ist (Virialsatz).

7.19. Man schätze die Größenordnung der folgenden Größen mit Hilfe des THOMAS-FERMI-Modells ab:

7.19.1. den mittleren Abstand zwischen Elektron und Kern,

7.19.2. die mittlere Energie der COULOMB-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen im Atom,

7.19.3. die mittlere kinetische Energie eines Elektrons,

7.19.4. die zur vollständigen Ionisierung des Atoms erforderliche Energie,

7.19.5. die mittlere Geschwindigkeit eines Elektrons im Atom,

7.19.6. den mittleren Drehimpuls eines Elektrons im Atom und

7.19.7. die mittlere radiale Quantenzahl eines Elektrons.

7.20.[1]) Die Energie eines Atoms ist mit Hilfe des THOMAS-FERMI-Modells genähert durch die Elektronendichte $\varrho(\mathfrak{r})$ auszudrücken.

7.21.[1]) Es ist zu zeigen, daß sich die THOMAS-FERMI-Gleichung als Bedingung dafür ergibt, daß die Gesamtenergie bei der Variation der Dichte $\varrho(\mathfrak{r})$ ein Minimum annimmt.

---

[1]) In den Aufgaben 7.20.–7.25. wird ein Maßsystem mit $e = \hbar = \mu = 1$ benutzt.

Hinweis: Man benutze das Ergebnis der vorigen Aufgabe. Bei der Variation von $E(\varrho)$ ist die Normierungsbedingung $\int \varrho \, d\tau = N$ zu beachten (für ein neutrales Atom gilt $N = Z$).

7.22.[1]) Mit Hilfe der Variationsmethode ist die beste Näherung für die Elektronendichte im THOMAS-FERMI-Modell zu finden. Man benutze Vergleichsfunktionen der Form

$$\varrho = \frac{A e^{-x}}{x^3}, \quad x = \sqrt{\frac{r}{\lambda}},$$

wobei A durch die Normierungsbedingung $\int \varrho \, d\tau = N$ bestimmt wird (für ein neutrales Atom gilt $Z = N$) und λ der Variationsparameter ist. Die Energie des Atoms (Ions) ist zu bestimmen.

Anmerkung: Bei der Wahl der Vergleichsfunktionen ist zu beachten, daß die exakte Lösung im Gebiet kleiner r eine Singularität vom Typ

$$\varrho \sim \frac{\text{const}}{r^{3/2}}$$

besitzt.

7.23.[1]) Man zeige, daß im THOMAS-FERMI-Modell der Virialsatz gilt.

7.24.[1]) Mit Hilfe des Virialsatzes ist zu zeigen, daß die elektrostatische Wechselwirkungsenergie der Elektronen eines neutralen Atoms im THOMAS-FERMI-Modell gleich einem Siebentel der Wechselwirkungsenergie zwischen den Elektronen und dem Kern ist.

7.25.[1]) In der THOMAS-FERMI-Näherung ist die zur vollständigen Ionisation eines Atoms (Ions) erforderliche Energie zu berechnen.

7.26. Man bestimme die Verschiebung der Energieniveaus eines Atoms, die aus den endlichen Abmessungen des Kerns resultiert. Das Potential kann im Kern ($r < a$) als konstant angenommen werden. (Diese Annahme bedeutet physikalisch, daß die elektrische Ladung des Kerns über die Oberfläche einer Kugel mit dem Radius a verteilt ist.)

7.27. Mit Hilfe der quasiklassischen Näherung berechne man den Wert von $\psi^2(0)$ für ein Valenzelektron im s-Zustand in einem Atom mit der Ladung Z.

---

[1]) In den Aufgaben 7.20.—7.25. wird ein Maßsystem mit $e = \hbar = \mu = 1$ benutzt.

7.28. Man bestimme die Komponente der magnetischen Feldstärke im Zentrum eines Wasserstoffatoms, die durch die Bahnbewegung des Elektrons erzeugt wird. Man berechne diese Größe für den $2p$-Zustand.

7.29. Wie ändert sich der Ausdruck für das magnetische Moment des Wasserstoffatoms bei Berücksichtigung der Kernbewegung?

7.30. Man berechne die Abstände zwischen den Hyperfeinstrukturtermen für das s-Elektron des Wasserstoffatoms.

7.31. Die Hyperfeinstrukturenergie eines Einelektronenatoms mit von Null verschiedenem Bahndrehimpuls ist zu berechnen.

7.32. Ein diamagnetisches Atom befinde sich in einem äußeren Magnetfeld. Man bestimme die im Mittelpunkt des Atoms induzierte magnetische Feldstärke.

7.33. Aufgabe 7.32. ist für den Fall des Heliums zu lösen.

7.34. Gesucht werden die möglichen Werte des Gesamtdrehimpulses für die Zustände ^1S, ^3S, ^3P, ^2D, ^4D.

7.35. Welche Zustände (Terme) sind für folgende Zweielektronenkonfigurationen möglich:

7.35.1. $ns\ n's$, *7.35.2.* $ns\ n'p$, *7.35.3.* $ns\ n'd$, *7.35.4.* $np\ n'p$?

7.36. Welche Terme sind für die Konfigurationen

7.36.1. $(np)^3$, *7.36.2.* $(nd)^2$, *7.36.3.* $ns\ (n'p)^4$
möglich?

7.37. Man bestimme die niedrigsten Terme der Elemente O, Cl, Fe, Co, As, La. (Die Elektronenkonfigurationen dieser Elemente findet man bei Blochinzew, „Grundlagen der Quantenmechanik", 4. Aufl., S. 508/09.)

Hinweis: Für die Lösung des Problems benötigt man die folgenden empirischen Regeln:

1. Für eine vorgegebene Elektronenkonfiguration besitzt der Term mit dem größten Wert von S und dem (bei diesem S) größtmöglichen Wert von L die kleinste Energie (Hundsche Regel).

2. Im Normalzustand des Atoms ist $J = |L - S|$, wenn eine nichtabgeschlossene Schale nicht mehr als die Hälfte der in ihr maximal möglichen

Zahl von Elektronen enthält, während $J = L + S$ gilt, wenn in ihr mehr als die Hälfte der Elektronen vorhanden ist.

7.38. Zu bestimmen sind die Paritäten der niedrigsten Terme der Elemente K, Zn, B, C, N, O, Cl.

7.39. Ein aus N Elektronen bestehendes System wird durch N Tripel von Quantenzahlen n, l, m_l charakterisiert. Wie groß ist die Zahl der Zustände mit einem vorgegebenen Wert M_S der z-Komponente des Gesamtspins?

7.40. Man berechne die Zahl der zur Konfiguration nl^x gehörigen Zustände.

7.41. Man beweise den Satz: Für die Konfiguration nl^x mit $x \leqq 2l + 1$ ist der Term mit dem größten Wert von L der Singuletterm mit $L = xl - \frac{1}{4}x(x-2)$, falls x gerade ist, und der Dubletterm mit $L = xl - \frac{1}{4}(x-1)^2$, falls x ungerade ist.

7.42. Aus den Wellenfunktionen des Einelektronenproblems sind die durch die Quantenzahlen S, L, M_S, M_L charakterisierten Eigenfunktionen für die Konfiguration p^3 zu bestimmen.

Hinweis: Man beachte die Wirkung der Operatoren $L_x - iL_y$ und $S_x - iS_y$ auf die antisymmetrischen Funktionen der nullten Näherung.

7.43. Man bestimme die Eigenfunktionen für die beiden ^2D-Terme der Konfiguration d^3.

7.44. Zwei Elektronen bewegen sich in einem Zentralfeld. Man betrachte die elektrostatische Wechselwirkung der Elektronen als Störung und bestimme die Störungsenergie in der ersten Ordnung für die zur Konfiguration $npn'p$ gehörigen Terme.

Hinweis: Die Summe der Wurzeln der Säkulargleichung ist gleich der Summe ihrer Diagonalelemente.

7.45. Man zeige, daß für die Spin-Bahn-Störung

$$V_{SL} = A\mathfrak{S}\mathfrak{L}$$

die mittlere Störung sämtlicher Zustände eines (durch die Quantenzahlen L und S charakterisierten) Terms gleich Null ist.

7.46. Man bestimme die Aufspaltung der Energieniveaus eines Atoms in einem schwachen Magnetfeld, wenn

$$\frac{e\hbar}{2\mu c} H \ll |\Delta E_{JJ'}|$$

gilt, wobei $\Delta E_{JJ'}$ der Abstand zwischen den Multiplettermen ist.

7.47. Innerhalb welcher Grenzen ändert sich der LANDÉ-Faktor g bei vorgegebenen Werten von L und S?

7.48. Man zeige, daß es für $^4D_{1/2}$-, $^5F_1$- und $^6G_{3/2}$-Terme keine Linienaufspaltung im Magnetfeld gibt.

7.49. Für ein Einelektronenatom (Wasserstoff, Alkalimetalle) ist der LANDÉ-Faktor direkt aus den PAULI-Funktionen zu bestimmen (vgl. Aufgabe 4.21.).

7.50. Das magnetische Moment eines Atoms ist durch den LANDÉ-Faktor auszudrücken.

7.51. Man berechne die Aufspaltung des Terms eines Einelektronenatoms in einem Feld mittlerer Stärke

$$\left(\frac{e\hbar}{2\mu c} H \approx |\Delta E_{jj}|\right).$$

7.52. Die Wellenfunktionen eines Elektrons sind unter den Bedingungen der Aufgabe 7.51. zu bestimmen.

7.53. Zu berechnen ist die Aufspaltung der Niveaus eines Wasserstoffatoms in einem starken Magnetfeld $\left(\frac{e\hbar}{2\mu c} H \gg |E_{nlj} - E_{nlj'}|\right)$. Um die Störungstheorie anwenden zu können, muß die Energie des Atoms im Magnetfeld klein gegen die Energiedifferenzen zwischen den verschiedenen Multipletts sein:

$$\frac{e\hbar}{2\mu c} H \ll |E_{nlj} - E_{n'lj}|.$$

7.54. Man berechne die ZEEMAN-Komponenten der Hyperfeinstruktur für den $^2S_{1/2}$-Term ($j = 1/2$, $l = 0$) im Falle eines Magnetfeldes mittlerer Stärke $\left(\frac{e\hbar}{2\mu c} H \approx |\Delta E_{ff'}|\right)$. (Die durch das Feld hervorgerufene Aufspaltung ist von derselben Größenordnung wie die Hyperfeinstrukturintervalle.)

7.55. Es ist zu beweisen, daß die Summe der Energieänderungen über alle Zustände mit vorgegebenem M_J, die durch ein Magnetfeld beliebiger Feldstärke entstehen, gleich

$$\frac{e\hbar}{2\mu c} HM_J \sum \left\{1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}\right\}$$

ist. Dabei wird die Summe über alle J mit $L + S \leqq J \leqq |L - S|$, $J \geqq M_J$ erstreckt.

7.56. Man zeige, daß für ein Wasserstoffatom, das sich in einem homogenen elektrischen Feld befindet, gilt:

7.56.1. Die Energie des Zustandes mit den Quantenzahlen $l = n - 1$, $m = n - 1$ ändert sich nicht in der bezüglich des Feldes linearen Näherung,

7.56.2. die Lage des Schwerpunktes des aufgespaltenen Terms ändert sich nicht, und

7.56.3. Zustände, die sich nur durch das Vorzeichen der magnetischen Quantenzahl voneinander unterscheiden, besitzen dieselbe Energie.

7.57. Man berechne die Aufspaltung der Niveaus eines Wasserstoffatoms in einem schwachen elektrischen Feld (der STARK-Effekt ist klein im Vergleich zur Feinstruktur).

7.58. Man bestimme das magnetische Moment eines Wasserstoffatoms in einem schwachen elektrischen Feld.

7.59. Zu berechnen ist die Aufspaltung des Terms mit $n = 2$ für ein Wasserstoffatom in einem elektrischen Feld mittlerer Stärke (STARK-Effekt und Feinstruktur sind von derselben Größenordnung).

7.60. Es wird ein Atom betrachtet, das unter dem Einfluß eines Störpotentials u steht. Durch Anwendung der Störungstheorie erhält man als Wellenfunktion in erster Ordnung

$$\psi = \psi_0 + \sum_{n \neq 0} \frac{u_{n0}}{E_0 - E_n} \psi_n$$

und als Energie

$$E = E_0 + u_{00} + \sum_{n \neq 0} \frac{(u_{n0})^2}{E_0 - E_n}.$$

Um die Variationsmethode anwenden zu können, vereinfachen wir die Form der Wellenfunktion soweit wie möglich. Wegen

$$\sum_{n \neq 0}^{\infty} u_{n0}\psi_n = -u_{00}\psi_0 + \sum_{n=0}^{\infty} u_{n0}\psi_n = \psi_0(u - u_{00})$$

kann ψ näherungsweise in der Form

$$\psi \approx \psi_0\left(1 + \frac{u - u_{00}}{E'}\right)$$

geschrieben werden, wobei E' in gewissen Fällen gleich dem Mittelwert von $E_0 - E_n$ gesetzt werden kann. Nachdem man die genäherte Form der gestörten Wellenfunktion erhalten hat, kann man die Energie mit Hilfe der Variationsmethode bestimmen.

Mittels der Variationsmethode ist die Energie eines Atoms zu bestimmen, auf welches ein Störpotential u wirkt. Man bestimme das Energieminimum für die Klasse der Vergleichsfunktionen von der Form

$$\psi = \psi_0(1 + \lambda u),$$

wobei λ der Variationsparameter ist.

7.61. Mit Hilfe des Ergebnisses der letzten Aufgabe ist die Formel für die Polarisierbarkeit des Atoms zu finden. Man bestimme den numerischen Wert der Polarisierbarkeit für das Wasserstoff- und Heliumatom im Grundzustand.

7.62. Ein Wasserstoffatom befinde sich in einem elektrischen und einem zu diesem parallelen magnetischen Feld. Man bestimme die Aufspaltung des Terms mit der Hauptquantenzahl $n = 2$:

7.62.1. für schwache Felder (die Energie der STARK- und ZEEMAN-Aufspaltung ist kleiner als die Energie der Feinstruktur),

7.62.2. für mittlere Felder.

7.63. Ein Wasserstoffatom in einem Zustand mit der Hauptquantenzahl $n = 2$ befinde sich in einem elektrischen und einem dazu senkrechten magnetischen Feld. Man bestimme die Aufspaltung des Niveaus unter der Voraussetzung starker Felder (die Energie des Elektrons im äußeren elektrischen und magnetischen Feld ist größer als die Energie der Feinstruktur).

8. MOLEKÜL

8.1. Man gebe die SCHRÖDINGER-Gleichung für ein zweiatomiges Molekül unter der Näherungsannahme an, daß der Molekülschwerpunkt mit dem Schwerpunkt der Kerne übereinstimmt. Zur Beschreibung der Elektronenbewegung ist ein mit den Kernen verbundenes rotierendes (körperfestes) Koordinatensystem zu wählen. Spineffekte sollen nicht berücksichtigt werden.

8.2. Man löse die Aufgabe 8.1., indem man die Spinzustände der Elektronen berücksichtigt und im körperfesten Koordinatensystem ξ, η, ζ beschreibt.

8.3. Bei kleinen Schwingungen der Kerne kann die Wellenfunktion eines zweiatomigen Moleküls genähert als Produkt der drei Funktionen

$$\Phi_{el}(\xi_i, \eta_i, \zeta_i, \sigma_i, p), \quad f(p), \quad \Theta(\vartheta, \varphi)$$

dargestellt werden. Die erste Funktion beschreibt die Bewegung der Elektronen bei festgehaltenen Kernen, die zweite und dritte Funktion beschreiben die Schwingungs- und Rotationszustände des Moleküls. Es ist die Gleichung zu finden, die die Schwingungs- und Rotationsanteile der Wellenfunktion eines zweiatomigen Moleküls bestimmt.

8.4. Man bestimme die möglichen Terme der zweiatomigen Moleküle N_2, Br_2, LiH, HBr, CN, die durch Vereinigung von zwei Atomen in ihren Grundzuständen entstanden sind.

8.5. Wie lautet die Formel, welche die Elektronenterme in der Wechselwirkung eines Heliumatoms mit einem Wasserstoffatom bestimmt, wenn sich beide Atome in ihren Grundzuständen befinden?

8.6. Zu bestimmen sind das Schwingungs- und Rotationsenergiespektrum eines zweiatomigen Moleküls für den Fall, daß sich die Kerne im Potentialfeld

$$V(r) = -2D\left(\frac{1}{\varrho} - \frac{1}{2\varrho^2}\right)$$

bewegen, wobei $\varrho = r/a$ ist.

8.7. Man stelle das effektive Potential der Aufgabe 8.6.,

$$V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} K(K+1),$$

in der Umgebung seines Minimums als Oszillatorpotential dar und bestimme die Energieniveaus für kleine Schwingungen.

8.8. Man bestimme das Trägheitsmoment und den Abstand zwischen den Kernen für das Molekül $^1H^{35}Cl$, wenn die Frequenzdifferenz zweier benachbarter Linien in der infraroten Rotationsschwingungsbande des $^1H^{35}Cl$ $\Delta\nu = 20{,}9\ \mathrm{cm}^{-1}$ ist.

Der entsprechende Wert von $\Delta\nu$ ist für das Spektrum von DCl zu berechnen.

8.9. Zu berechnen ist das Verhältnis der Energiedifferenzen zwischen den ersten beiden Schwingungs- und den ersten beiden Rotationsniveaus des Moleküls HF. Das Trägheitsmoment des Moleküls HF beträgt $I = 1{,}35 \cdot 10^{-40}\ \mathrm{g\,cm}^2$. Seine Schwingungsfrequenz ist $\Delta\nu_{\mathrm{schw}} = 3987\ \mathrm{cm}^{-1}$.

8.10. Man berechne die Dissoziationsenergie des Moleküls D_2, wenn das Molekül H_2 die Dissoziationsenergie 4,46 eV und die Nullpunktsschwingungsenergie 0,26 eV besitzt.

8.11. Der Verlauf der Kurve für die potentielle Energie eines zweiatomigen Moleküls wird häufig durch das MORSE-Potential

$$V = D(1 - \mathrm{e}^{-2\beta\xi})^2$$

mit $\xi = (r - a)/a$ approximiert. Man bestimme das Schwingungsenergiespektrum für $K = 0$.

8.12. Es ist zu beweisen, daß sich der Operator des Quadrates des Gesamtdrehimpulses eines zweiatomigen Moleküls in folgender Form schreiben läßt:

$$\mathfrak{J}^2 = -\left\{\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - iM_\zeta\cos\vartheta\right)^2\right\} + M_\zeta^2 .$$

8.13. Die Achsen eines kartesischen Koordinatensystems, das mit einem rotierenden starren Körper verbunden ist, seien ξ, η, ζ. Zu bestimmen ist die Form der Operatoren J_ξ, J_η, J_ζ der Drehimpulskomponenten bezüglich der Achsen des starren Körpers.

8.14. Man zeige, daß für die Operatoren J_ξ, J_η, J_ζ folgende Vertauschungsregeln gelten:

$$J_\xi J_\eta - J_\eta J_\xi = -iJ_\zeta,$$

$$J_\eta J_\zeta - J_\zeta J_\eta = -iJ_\xi,$$

$$J_\zeta J_\xi - J_\xi J_\zeta = -iJ_\eta .$$

Die Vertauschungsregeln, denen die Operatoren der Drehimpulskomponenten im rotierenden Koordinatensystem genügen, unterscheiden sich also von den Vertauschungsregeln im raumfesten Koordinatensystem nur durch das Vorzeichen auf den rechten Seiten der angegebenen Gleichungen.

8.15. In der klassischen Mechanik gelten für den EULER-POINSOTschen Fall die Gleichungen

$$A\frac{dp}{dt} + (C - B)\,qr = 0,$$

$$B\frac{dq}{dt} + (A - C)\,rp = 0,$$

$$C\frac{dr}{dt} + (B - A)\,pq = 0$$

oder

$$\frac{dJ_\xi}{dt} + \left(\frac{1}{B} - \frac{1}{C}\right) J_\eta J_\zeta = 0 \quad \text{usw.}$$

Es ist zu zeigen, daß die angegebenen Relationen in der Quantenmechanik folgende Form annehmen:

$$\frac{dJ_\xi}{dt} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{B} - \frac{1}{C}\right)(J_\eta J_\zeta + J_\zeta J_\eta) = 0 \text{ usw.}$$

8.16. Moleküle, die zwei oder mehr Symmetrieachsen dritter oder höherer Ordnung besitzen (z. B. CH_4), können als Kugelkreisel aufgefaßt werden. Bei solchen Molekülen entartet das Trägheitsellipsoid in eine Kugel ($A = B = C$). Man bestimme die Energieniveaus eines solchen Kugelkreisels.

8.17. Moleküle, welche Symmetrieachsen höherer als zweiter Ordnung besitzen (z. B. SO_2, NH_3, CH_3Cl), und Moleküle, welche geringere oder überhaupt keine Symmetrie aufweisen, die jedoch zwei identische Hauptträgheitsmomente haben, können als symmetrische Kreisel mit $A = B \neq C$ aufgefaßt werden.

Man bestimme die Energieniveaus eines symmetrischen Kreisels.

8.18. Man gebe die SCHRÖDINGER-Gleichung für einen symmetrischen Kreisel an.

8.19. Man bestimme die Eigenfunktionen des Operators

$$\mathfrak{J}^2 = -\left\{\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial\psi^2}\right)\right.$$
$$\left. - 2\frac{\cos\vartheta}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi\,\partial\psi}\right\}.$$

8.20. Zu berechnen sind die Matrixelemente des HAMILTON-Operators für einen unsymmetrischen Kreisel.

8.21. Man berechne die Energieniveaus eines unsymmetrischen Kreisels für $J = 1$.

8.22. Die Wellenfunktionen eines unsymmetrischen Kreisels sind für $J = 1$ zu bestimmen.

8.23. Mit Hilfe der Eigenschaften der PAULI-Matrizen ist zu zeigen, daß die $^2\Sigma$-Terme eines zweiatomigen Moleküls selbst bei Berücksichtigung der Spin-Spin-Wechselwirkung nicht aufgespalten werden.

8.24. Man bestimme die Multiplettaufspaltung des $^3\Sigma$-Terms für den HUNDschen Kopplungsfall *b*.

8.25. In der Aufgabe 8.3. wurde der Operator

$$\frac{i\hbar^2}{2M\varrho^2}\left\{\cot\vartheta\,(M_\xi - iM_\eta M_\zeta - iM_\zeta M_\eta) + \frac{2}{\sin\vartheta}M_\eta\frac{\partial}{\partial\varphi} + 2M_\xi\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right\} = w$$

bei der genäherten Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung nicht berücksichtigt, da das Diagonalelement dieses Operators verschwindet. Die Berücksichtigung der Nichtdiagonalelemente, die zu demselben Elektronen- und Schwingungszustand, charakterisiert durch n, Λ bzw. v, gehören, führt zu einem Effekt, der als Spin-Rotations-Wechselwirkung bezeichnet wird. Man betrachte den Operator w als Störung und bestimme die Änderung der Niveaus des Dubletterms, die durch diese Störung hervorgerufen wird.

8.26. Man bestimme die Relation zwischen dem Gesamtspin der Kerne des D_2-Moleküls im Σ-Zustand und den möglichen Werten der Quantenzahl K.

8.27. Man berechne die ZEEMAN-Aufspaltung des Terms eines zweiatomigen Moleküls (HUNDscher Kopplungsfall *a*). Das Magnetfeld wird als schwach vorausgesetzt, d. h., die Wechselwirkungsenergie zwischen Spin und dem

äußeren Magnetfeld soll klein gegen die Energiedifferenzen zweier aufeinanderfolgender Rotationsniveaus sein.

8.28. Man bestimme die ZEEMAN-Aufspaltung des Terms eines zweiatomigen Moleküls im HUNDschen Kopplungsfall *b*, wobei das Magnetfeld so beschaffen sein soll, daß die Wechselwirkungsenergie zwischen Spin und äußerem Magnetfeld klein gegen die Spin-Achsen-Wechselwirkungsenergie ist.

8.29. Die Aufgabe 8.28. ist für den Fall zu lösen, daß die Spin-Achsen-Wechselwirkungsenergie klein gegen die durch das äußere Magnetfeld erzeugten Energieänderungen ist.

8.30. Man berechne die ZEEMAN-Aufspaltung des Dubletterms eines zweiatomigen Moleküls, falls der Term zum HUNDschen Kopplungsfall *b* gehört und das Magnetfeld so beschaffen ist, daß die Wechselwirkungsenergie zwischen dem magnetischen Moment und dem Feld von derselben Größenordnung wie die Spin-Achsen-Wechselwirkungsenergie ist.

8.31. Ein zweiatomiges Molekül, das ein konstantes Dipolmoment $\mathfrak{p}$ besitzt, befinde sich in einem elektrischen Feld. Man berechne die Aufspaltung des Terms für den Kopplungsfall *a*.

8.32. Man löse die vorige Aufgabe für den Term im Kopplungsfall *b*.

8.33. Man bestimme die Energie eines starren Dipols p, der sich in einem homogenen elektrischen Feld $\mathfrak{E}$ befindet. Das Feld ist als kleine Störung zu betrachten.

Hinweis: Man benutze die Beziehung

$$\cos\vartheta\, P_{l,m} = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l+1)}}\, P_{l+1,m} + \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}}\, P_{l-1,m}.$$

8.34. Mit Hilfe der Störungstheorie soll das Wechselwirkungsgesetz zwischen zwei nicht angeregten Wasserstoffatomen abgeleitet werden, die sich in einem großen Abstand R voneinander befinden.

8.35. Es wird eine Gruppe von Atomen mit kugelsymmetrischen Ladungsverteilungen betrachtet. Wie in der vorigen Aufgabe gezeigt wurde, wirken zwischen zwei derartigen Atomen, die sehr weit voneinander entfernt sind, die sogenannten Dispersionskräfte. Die Dispersionskräfte besitzen Quantencharakter und haben zum Unterschied von den klassischen Polarisations-

kräften die Eigenschaft der Additivität. Man zeige, daß die Wechselwirkungsenergie zwischen zwei solchen Atomen nicht von der Anwesenheit weiterer ähnlicher Atome abhängt, d. h., daß die Wechselwirkungsenergie einer Gruppe von Atomen gleich der Summe aus den Wechselwirkungsenergien der einzelnen Atompaare ist.

9. STREUUNG

9.1. Man bestimme den Wirkungsquerschnitt für die Streuung eines Teilchens am Potentialtopf bei kleinen Geschwindigkeiten (die DE-BROGLIE-Wellenlänge ist groß gegen die Abmessung des Topfes).

9.2. Zu berechnen ist der Wirkungsquerschnitt für die Streuung langsamer Teilchen durch das abstoßende Feld

$$U(r) = \begin{cases} U_0 & \text{für} \quad r < a, \\ 0 & \text{für} \quad r > a. \end{cases}$$

9.3. Die ersten drei Koeffizienten in der Entwicklung des elastischen Streuquerschnitts $d\sigma/d\Omega$ nach LEGENDREschen Polynomen sind durch die Streuphasen auszudrücken.

9.4. Man bestimme die Streuphasen für das Feld $U = A/r^2$ und berechne den Wirkungsquerschnitt für die Streuung um kleine Winkel.

9.5. Man berechne den differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Streuung im abstoßenden Feld $U = A/r^2$ in BORNscher Näherung sowie nach der klassischen Mechanik und bestimme die Grenzen der Anwendbarkeit der erhaltenen Formeln.

9.6. Es sind die diskreten Niveaus eines Teilchens im anziehenden Feld

$$U(r) = -U_0 \exp(-r/a)$$

für $l = 0$ anzugeben. Man berechne die Streuphase δ_0 für das vorliegende Potential und diskutiere den Zusammenhang zwischen δ_0 und dem diskreten Spektrum.

9.7. Man zeige, daß im Falle des COULOMB-Feldes eine eindeutige Zuordnung zwischen den Polen der Streuamplitude und den Niveaus des diskreten Spektrums besteht.

Hinweis: Man benutze die Beziehung

$$e^{2i\delta_l} = \frac{\Gamma\left(l + 1 + \frac{i}{k}\right)}{\Gamma\left(l + 1 - \frac{i}{k}\right)}.$$

9.8. Wie ändern sich die Streuphasen bei einer kleinen Änderung des Streupotentials? Für den Fall, daß das Potential selbst als Störung aufgefaßt werden kann, ist der Ausdruck für die Streuphasen anzugeben.

9.9. Man berechne die Streuphasen langsamer Teilchen im Feld $V = \alpha/r^3$. Die Teilchen sollen so langsam sein, daß die Bedingung $\mu\alpha k/\hbar^2 \ll 1$ erfüllt ist.

9.10. Zu bestimmen ist der totale Wirkungsquerschnitt für die elastische Streuung schneller Teilchen an einer völlig undurchdringlichen Kugel mit dem Radius a (es soll $\lambda \ll a$ gelten, wobei λ die DE-BROGLIE-Wellenlänge ist).

9.11. Man berechne in BORNscher Näherung die differentiellen und totalen Wirkungsquerschnitte für die Streuung in folgenden Feldern:

9.11.1. $U(r) = g^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r}$,

9.11.2. $U(r) = U_0 e^{-\alpha^2 r^2}$,

9.11.3. $U(r) = U_0 e^{-\alpha r}$.

9.12. In der BORNschen Näherung sind der differentielle und der totale Wirkungsquerschnitt für die Streuung schneller Elektronen

9.12.1. an einem Wasserstoffatom und

9.12.2. an einem Heliumatom zu berechnen.

9.13. Man berechne den Wirkungsquerschnitt für die Streuung langsamer Teilchen ($ka \ll 1$) im anziehenden Feld

$$V(r) = -V_0 \cosh^{-2} r/a.$$

9.14. Man berechne den Wirkungsquerschnitt für die Streuung langsamer Teilchen im abstoßenden Feld

$$V(r) = V_0 \cosh^{-2} r/a.$$

9.15. Betrachtet wird der Stoß zweier identischer Teilchen mit der Wechselwirkungsenergie $U(r)$. Es ist der Wirkungsquerschnitt für die Streuung langsamer identischer Teilchen im Falle kurzreichweitiger Kräfte zu bestimmen.

9.16. Man berechne den Wirkungsquerschnitt für die elastische Streuung eines Elektrons an einem Elektron und eines α-Teilchens an einem α-Teilchen.

9.17. Es ist zu beweisen, daß die Streulänge die folgenden Eigenschaften besitzt (als Streulänge wird die für $E \to 0$ mit umgekehrtem Vorzeichen genommene Streuamplitude bezeichnet):

9.17.1. In einem abstoßenden Feld ist die Streulänge positiv.

9.17.2. In einem anziehenden Feld ist die Streulänge negativ, falls keine diskreten Niveaus vorhanden sind.

9.17.3. Die Streulänge strebt gegen Unendlich, wenn bei zunehmender Tiefe des Potentialtopfes ein neues Niveau erscheint.

Hinweis: Geht man von der SCHRÖDINGER-Gleichung zur äquivalenten Integralgleichung über ($E = 0$),

$$\psi = 1 - \frac{\mu}{2\pi \hbar^2} \int \frac{U(\mathfrak{r}')\, \psi(\mathfrak{r}')}{|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|}\, d\tau',$$

so erhält man die asymptotische Form von ψ,

$$\psi = 1 - \frac{a}{r},$$

wobei die Streulänge

$$a = \frac{\mu}{2\pi \hbar^2} \int \psi U \, d\tau$$

durch die potentielle Energie und $\psi_{E=0}$ ausgedrückt wird.

9.18. Für die meisten Kerne ist die Streulänge a der Neutronen (vgl. Aufgabe 9.17.) positiv (z. B. Be, C, N, O, F, Mg, Ca, Zn, Cu, Ba, Pb usw.). Für einige Kerne ist die Streulänge negativ (Li, Mn).

Man bestimme die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die Streulänge ein negatives Vorzeichen besitzt, im Falle von Neutronen, die an einem Kern mit dem Atomgewicht A gestreut werden. Als Modell für die potentielle Energie des Neutrons im Kern verwende man einen rechteckigen Potentialtopf mit dem Radius $R = 1{,}4 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$ cm und der Tiefe $V_0 = 40$ MeV.

9.19. Die Streuung von Neutronen an Protonen hängt vom resultierenden Spin des Neutrons und Protons ab. Bei kleinen Energien beträgt der Wirkungsquerschnitt im Falle des Tripletts ($S = 1$)

$$\sigma^{\text{trip}} = 4\pi|a_1|^2 \approx 2 \cdot 10^{-24}\,\text{cm}^2$$

und im Falle des Singuletts ($S = 0$)

$$\sigma^{\text{sing}} = 4\pi|a_0|^2 \approx 78 \cdot 10^{-24}\,\text{cm}^2.$$

Wir führen den Operator a ein:

$$a = \frac{a_0 + 3a_1}{4} + \frac{a_1 - a_0}{4}(\vec{\sigma}_n\vec{\sigma}_p).$$

Wie man sofort sieht, ist der Eigenwert im Triplett- bzw. Singulettzustand gleich a_1 bzw. a_0. Um den Streuquerschnitt bei beliebiger Polarisation der Neutronen zu erhalten, muß man den Mittelwert des Operators a^2 bilden:

$$\sigma = 4\pi\,\overline{a^2}.$$

Die Spinzustände der einfallenden Neutronen mögen durch die Funktion

$$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha}\cos\beta \\ e^{+i\alpha}\sin\beta \end{pmatrix}$$

(die Richtung des Neutronenspins wird durch die Polarwinkel $\Theta = 2\beta$, $\Phi = 2\alpha + \pi/2$ angegeben, vgl. Aufgabe 4.12.) und der Spinzustand des Protons durch die Funktion

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

beschrieben werden (der Protonenspin hat die Richtung der z-Achse). Man bestimme für diesen Fall den Wirkungsquerschnitt für die Neutron-Proton-Streuung.

9.20. Zu bestimmen ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß langsame Neutronen, die an Protonen gestreut werden, ihre Spinorientierung ändern, wenn vor dem Stoß die Neutronenspins die Richtung der z-Achse und die Protonenspins die entgegengesetzte Richtung besitzen.

9.21. Langsame Neutronen werden an einem Wasserstoffmolekül gestreut. Ist die Energie der Neutronen klein gegen die Energie thermischer Neutronen ($\lambda > 10^{-8}$ cm, d. h., die Wellenlänge der einfallenden Neutronen ist groß

gegen den Abstand zwischen den Protonen im Molekül), so ist die Streuamplitude gleich der Summe der Streuamplituden der beiden Protonen.

Es gilt also

$$a = \frac{a_0 + 3a_1}{2} + \frac{a_1 - a_0}{4} \{\vec{\sigma}_n (\vec{\sigma}_{p_1} + \vec{\sigma}_{p_2})\}.$$

Die Protonen können sich im Molekül sowohl im Zustand mit parallelen Spins (Ortho-Wasserstoff) als auch im Zustand mit antiparallelen Spins (Para-Wasserstoff) befinden.

Man bestimme den Wirkungsquerschnitt für die Streuung der Neutronen an Para- und Ortho-Wasserstoff.

9.22. Man bestimme den totalen Wirkungsquerschnitt für die elastische Streuung schneller Teilchen an einer undurchlässigen Kugel mit dem Radius a (für die DE-BROGLIE-Wellenlänge soll gelten $\lambda \ll a$).

9.23. Ein langsames Teilchen wird durch einen Kern mit dem Spin I gestreut. Man berechne den Wirkungsquerschnitt für nichtpolarisierte Neutronen.

9.24. Betrachtet wird die elastische Streuung eines Teilchens mit dem Spin $^1/_2$ an einem skalaren Teilchen (Spin Null). Man berechne den differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Streuung mit Umklappen des Spins und untersuche die Streuung der S- und P-Wellen.

9.25. Man beweise, daß im allgemeinen Fall der unelastischen Streuung der totale Wirkungsquerschnitt $\sigma = \sigma_e + \sigma_u$ und die Streuamplitude der elastischen Streuung für $\vartheta = 0$ durch die Beziehung

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \mathfrak{Im}\, f(0)$$

miteinander verknüpft sind.

Hinweis: Man benutze die Entwicklungen dieser Größen nach den Bahndrehimpulsen:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)(\eta_l - 1) P_l(\cos\vartheta),$$

$$\sigma_e = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)|1 - \eta_l|^2,$$

$$\sigma_u = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1)(1 - |\eta_l|^2).$$

9.26. Wir betrachten den Grenzfall des sogenannten schwarzen Kerns. Der Radius R des Kerns sei groß gegen die DE-BROGLIE-Wellenlänge der einfallenden Neutronen. Wir nehmen an, daß alle einfallenden Neutronen absorbiert werden. Es sind die totalen Wirkungsquerschnitte für Streuung und Absorption zu berechnen.

9.27. Wir betrachten die Kernreaktion

$$\mathrm{A} + \mathrm{a} \to \mathrm{C} \to \mathrm{B} + \mathrm{b}.$$

Gesucht wird die Winkelverteilung der Reaktionsprodukte im Massenmittelpunktsystem oder, was dasselbe bedeutet, im System des Zwischenkerns C, falls jeweils eine der folgenden Größen gleich Null ist:

9.27.1. der Spin des Zwischenkerns,

9.27.2. der Bahndrehimpuls der Relativbewegung der Reaktionsprodukte und

9.27.3. der relative Bahndrehimpuls der stoßenden Teilchen (bei von Null verschiedenem Spin des Zwischenkerns).

9.28. Man bestimme die Eigenfunktionen des Operators des Gesamtisospinquadrates $\mathfrak{J}^2$ und der Komponente I_z eines Meson-Nukleon-Systems.[1]

9.29. Im Massenmittelpunktsystem reduziert sich die Streuung von Mesonen an Nukleonen auf die Streuung von Teilchen an einem festen Streuzentrum. In großem Abstand vom Zentrum kann eine einfallende Welle mit definierter Spinkomponente S_z und Isospinkomponente τ_z wie folgt geschrieben werden:

$$e^{ikz}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\delta(\pi - \pi_i)\,\delta(n - \tau_z).$$

Dabei nimmt π_i die Werte

$$\pi_i = 1 \quad \text{für ein} \quad \pi^+\text{-Meson}, \quad \delta(\pi - 1) = \varphi_+,$$

$$\pi_i = 0 \quad \text{für ein} \quad \pi^0\text{-Meson}, \quad \delta(\pi) = \varphi_0,$$

$$\pi_i = -1 \quad \text{für ein} \quad \pi^-\text{-Meson}, \quad \delta(\pi + 1) = \varphi_-$$

an; für τ_z gilt

$$\tau_z = {}^1/_2 \quad \text{für ein Proton,} \quad \delta(n - {}^1/_2) = \psi_p,$$

$$\tau_z = -{}^1/_2 \quad \text{für ein Neutron,} \quad \delta(n + {}^1/_2) = \psi_n.$$

[1]) Siehe Anhang II.

Man entwickle die einfallende Welle nach Eigenfunktionen der Operatoren $\mathfrak{J}^2$, J_z, $\mathfrak{I}^2$, I_z.

Hinweis: Die Parität $(-1)^l$, der Gesamtdrehimpuls J und der Isospin I sind Erhaltungsgrößen des Meson-Nukleon-Systems.

Da der Gesamtspin eines solchen Systems gleich $^1/_2$ ist, bleibt der Bahndrehimpuls ebenfalls erhalten. Bei der Entwicklung der einfallenden Welle nach Eigenfunktionen der Operatoren der Erhaltungsgrößen kann man daher statt der Summe über J, I die Summe über l, I nehmen.

9.30. Man bestimme die Streuamplituden der Streuung von π-Mesonen an Nukleonen, durch die Streuphasen ausgedrückt, für die folgenden Reaktionen:

$$\pi^+ + \mathrm{p} \to \pi^+ + \mathrm{p},$$

$$\pi^- + \mathrm{p} \to \pi^- + \mathrm{p},$$

$$\pi^- + \mathrm{p} \to \pi^0 + \mathrm{n}.$$

9.31. Es ist zu zeigen, daß die Streuamplituden aller möglichen Reaktionen eines Mesons und Nukleons auf Grund der Isospinerhaltung durch die Amplituden der in der vorigen Aufgabe angegebenen Reaktionen ausgedrückt werden können.

Die fraglichen Streuamplituden sind durch die Streuamplituden für die Zustände mit den Isospins $^3/_2$ und $^1/_2$ auszudrücken.

9.32. Die totalen Wirkungsquerschnitte der Reaktionen

$$\pi^+ + \mathrm{p} \to \pi^+ + \mathrm{p},$$

$$\pi^- + \mathrm{p} \to \pi^- + \mathrm{p},$$

$$\pi^- + \mathrm{p} \to \pi^0 + \mathrm{n}$$

sollen durch die Streuphasen ausgedrückt werden.

9.33. Im Gebiet kleiner Energien, in dem die Wellenlänge eines Mesons groß gegen die Reichweite der Meson-Nukleon-Wechselwirkungskräfte ist, rührt der Hauptbeitrag zur Streuung von den S- und P-Wellen her.

Man bestimme die effektiven Streuquerschnitte, durch die Streuphasen ausgedrückt, für die Reaktionen

$$\pi^+ + \mathrm{p} \to \pi^+ + \mathrm{p},$$

$$\pi^- + \mathrm{p} \to \pi^- + \mathrm{p},$$

$$\pi^- + \mathrm{p} \to \pi^0 + \mathrm{n}.$$

9.34. Ein Bündel von π-Mesonen wird durch ein nichtpolarisiertes Protonentarget gestreut (d. h., im Target ist die Zahl der Protonen mit $m_s = {}^1/_2$ genauso groß wie die Zahl der Protonen mit $m_s = -{}^1/_2$). Die zu Anfang nichtpolarisierten Protonen werden durch die Streuung polarisiert. Man berechne die Größe der Polarisation der Protonen, indem man nur *S*- und *P*-Wellen berücksichtigt.

LÖSUNGEN

1. EINDIMENSIONALE BEWEGUNG. ENERGIESPEKTRUM UND WELLENFUNKTIONEN

1.1. $$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu\, a^2} n^2, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x.$$

1.3. $$|a(p)|^2 = \frac{4n^2\, \pi a}{\hbar} \frac{1}{\left(\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} - n^2 \pi^2\right)^2} \begin{cases} \cos^2 \frac{pa}{2\hbar} & \text{für ungerades } n, \\ \sin^2 \frac{pa}{2\hbar} & \text{für gerades } n. \end{cases}$$

1.4. $$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V_1)\,\psi = 0 \quad (x < 0),$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + E\psi = 0 \qquad (0 < x < a),$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V_2)\,\psi = 0 \quad (x > a).$$

Mit den Bezeichnungen

$$\varkappa_1 = \frac{\sqrt{2\mu(V_1 - E)}}{\hbar}, \quad \varkappa = \frac{\sqrt{-2\mu\, E}}{\hbar}, \quad \varkappa_2 = \frac{\sqrt{2\mu(V_2 - E)}}{\hbar}$$

läßt sich die allgemeine Lösung in folgender Form schreiben:

$$\psi = A_1 e^{-\varkappa_1 x} + B_1 e^{\varkappa_1 x} \quad (x < 0),$$

$$\psi = A e^{-\varkappa x} + B e^{\varkappa x} \qquad (0 < x < a),$$

$$\psi = A_2 e^{-\varkappa_2 x} + B_2 e^{\varkappa_2 x} \quad (x > a).$$

Wir betrachten das diskrete Spektrum ($E < V_2$). In diesem Fall sind $\varkappa_1$ und $\varkappa_2$ reelle Größen. Setzt man nun für das Gebiet $0 < x < a$ die Größe $\varkappa = ik$ (k reell), so ergibt sich die Lösung in der Form

$$\psi = \sin(kx + \delta) \quad (0 < x < a).$$

Da die Wellenfunktion endlich bleiben muß, folgt $A_1 = 0$, $B_2 = 0$.

Es ist zweckmäßig, die Bedingung der Stetigkeit von ψ und $\frac{d\psi}{dx}$ als Stetigkeitsbedingung für die logarithmische Ableitung $\frac{1}{\psi}\frac{d\psi}{dx}$ zu formulieren:

$$\varkappa_1 = k \cot \delta,$$

$$-\varkappa_2 = k \cot (ka + \delta).$$

In diesen beiden Gleichungen lassen sich $\varkappa_1$ und $\varkappa_2$ durch k ausdrücken. Es wird

$$\sqrt{\frac{2\mu V_1}{\hbar^2 k^2} - 1} = \cot \delta,$$

$$-\sqrt{\frac{2\mu V_2}{\hbar^2 k^2} - 1} = \cot (ka + \delta).$$

Da der Kotangens eine periodische Funktion mit der Periode π ist, lassen sich die Größen δ und $ka + \delta$ folgendermaßen darstellen:

$$\delta = \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_1}} + n_1 \pi,$$

$$ka + \delta = -\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_2}} + n_2 \pi.$$

Die Werte des arc sin liegen dabei zwischen 0 und $\pi/2$. Durch Elimination von δ erhält man eine transzendente Gleichung für die Bestimmung der Energieniveaus des diskreten Spektrums:

$$ka = n\pi - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_1}} - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_2}}, \quad k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} > 0.$$

Die dieser Gleichung genügenden Größen k werden am besten graphisch als Schnittpunkte der Geraden $y = ak$ mit den Kurven

$$y = n\pi - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_1}} - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_2}}$$

(Abb. 18) bestimmt.

Wir betrachten noch den symmetrischen Potentialtopf: $V_1 = V_2 = V$. Man erkennt sofort, daß in diesem Fall für beliebige Werte von V und a stets mindestens ein Niveau existiert. Für $\frac{\sqrt{2\mu V}}{\hbar} a \ll 1$ läßt sich die Lage des

einzigen diskreten Energieniveaus leicht bestimmen. Durch Reihenentwicklung von $\pi - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E}{V}}$ erhält man $E \approx V - \frac{\mu a^2}{2\hbar^2} V^2$. Für beliebige Werte

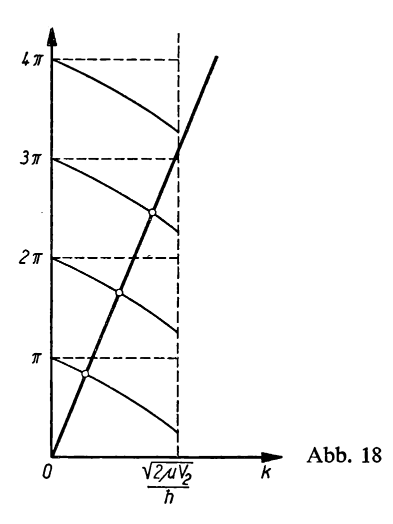


Abb. 18

von V und a ist die Zahl der Niveaus N durch

$$N > \frac{\sqrt{2\mu V} a}{\pi \hbar} > N - 1$$

gegeben.

1.5. Wir bezeichnen die Energie des gebundenen Zustandes mit E $(E < 0)$. Mit dem Ergebnis der vorigen Aufgabe finden wir

$$q \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{V_0}} \sqrt{1 - \frac{|E|}{V_0}} = n\pi - 2 \arcsin \sqrt{1 - \frac{|E|}{V_0}}.$$

Die linke Seite der Gleichung strebt für $V_0 \to \infty$ gegen Null. Wir haben daher nur einen einzigen gebundenen Zustand $(n = 1)$ und können setzen

$$\arcsin \sqrt{1 - \frac{|E|}{V_0}} = \frac{\pi}{2} - \alpha,$$

wobei α eine kleine Größe ist. Wir erhalten

$$q \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \sqrt{1 - \frac{|E|}{V_0}} = 2\sqrt{|E|}.$$

Für $V_0 \to \infty$ folgt schließlich

$$E = -\frac{\mu q^2}{2\hbar^2}.$$

1.6.

1.6.2. Die Eigenwerte des Operators H' sind immer positiv. Ist ψ_0 die Wellenfunktion, die dem Zustand mit der niedrigsten Energie entspricht, so gilt daher

$$(Q + iP)\,\psi_0 = 0 \quad \text{oder} \quad \left(\frac{\partial}{\partial Q} + Q\right)\psi_0 = 0.$$

Hieraus folgt

$$\psi_0 = c_0 e^{-Q^2/2}, \quad \varepsilon_0 = {}^1/_2.$$

So findet man für die Energie des Oszillators

$$\varepsilon_n = n + {}^1/_2 \qquad (n \geqq 0)$$

und für die entsprechende Wellenfunktion

$$\psi_n = A_n \left(\frac{\partial}{\partial Q} - Q\right)^n e^{Q^2/2}.$$

Die Normierungskonstante A_n ergibt sich aus der Bedingung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^2\,(Q)\,dQ = 1.$$

Für den Grundzustand ist die Normierungskonstante $A_0 = 1/\sqrt[4]{\pi}$, so daß man

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\, e^{-Q^2/2}$$

erhält.

Die Wellenfunktion des n-ten Zustandes kann durch die Wellenfunktion des $(n-1)$-ten Zustandes ausgedrückt werden:

$$\psi_n\,(Q) = c_n(Q - iP)\,\psi_{n-1}(Q).$$

Dabei ergibt sich c_n aus der Bedingung

$$c_n^2 \int [(Q - iP)\,\psi_{n-1}(Q)]^2\,dQ = 1.$$

Ersetzen von P durch $-i\frac{\partial}{\partial Q}$ und partielle Integration liefern

$$c_n^2\int \psi_{n-1}(P^2+Q^2+1)\,\psi_{n-1}\,dQ = c_n^2\cdot 2n = 1,$$

d. h.

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{2n}}$$

und

$$\psi_n = c_n\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)\psi_{n-1} = c_n c_{n-1}\cdot\ldots\cdot c_1\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^n\psi_0$$

$$= A_n\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^n\psi_0\,.$$

Insgesamt ergibt sich

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^n e^{-Q^2/2}.$$

Das Polynom n-ten Grades

$$H_n(Q) = e^{Q^2/2}\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^n e^{-Q/^22}$$

wird als HERMITE-TSCHEBYSCHEFFsches Polynom bezeichnet.

1.6.3. $aa^+ - a^+a = 1;\quad \psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n\,\psi_0.$

1.6.4. $(P+iQ)^n_{n-1}\,[(P+iQ)^n_{n-1}]^* = 2n.$

Die Wellenfunktionen ψ_n wurden hier reell gewählt. Daher sind die Matrixelemente von Q und $iP = \frac{\partial}{\partial Q}$ ebenfalls reell:

$$(Q)^n_{n-1} = \sqrt{\frac{n}{2}},\quad (P)^n_{n-1} = i\sqrt{\frac{n}{2}}.$$

Mit den ursprünglichen Variablen erhält man

$$(x)^n_{n-1} = (x)^{n-1}_n = \sqrt{\frac{\hbar n}{2\mu\omega}},\quad (p)^n_{n-1} = -(p)^{n-1}_n = i\sqrt{\frac{n\mu\hbar\omega}{2}}.$$

1.8. Die gesuchte Wahrscheinlichkeit ist

$$w = \frac{\int_1^\infty \exp(-y^2)\,dy}{\int_0^\infty \exp(-y^2)\,dy} \approx 0{,}16.$$

1.9. Die Wellenfunktion muß für $x \to 0$ verschwinden und für $x > 0$ der Differentialgleichung für den Oszillator genügen. Wie man sofort sieht, verschwinden die Wellenfunktionen des Oszillators bei ungeraden $n = 2k + 1$ für $x \to 0$ und liefern für $x > 0$ die Lösung des Problems. Folglich gilt

$$E_k = \hbar\omega\left(2k + \frac{3}{2}\right) \quad (k = 0, 1, 2, \ldots).$$

1.10.

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} - \frac{1}{2}\mu\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)a_n(p) = E_n a_n(p),$$

$$|a_n(p)|^2 = \frac{1}{2^n n!\sqrt{\pi\mu\omega\hbar}}\,\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{\mu\omega\hbar}}\,H_n^2\left(\frac{p}{\sqrt{\mu\omega\hbar}}\right).$$

1.11. Die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} - \left[E - V_0\left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a}\right)^2\right]\psi = 0$$

hat für $x \to \infty$ die asymptotische Form $\psi \sim \exp(-\xi/2)$, wobei ξ die neue unabhängige Variable ist:

$$\xi = \frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar a}x^2.$$

Für $x \to 0$ ist ψ proportional $\xi^{\nu/2}$ mit

$$\nu = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} + 1\right).$$

Setzt man

$$\psi = \mathrm{e}^{-\xi/2}\xi^{\nu/2}u(\xi),$$

so erhält man für $u(\xi)$ die Gleichung

$$\xi u'' + \left(\nu + \frac{1}{2} - \xi\right)u' - \left[\frac{\nu}{2} + \frac{1}{4} - \frac{\mu a(E + 2V_0)}{2\hbar\sqrt{2\mu V_0}}\right]u = 0. \tag{1}$$

Die Lösungen der Gleichung (1) sind die konfluenten hypergeometrischen Funktionen, und die allgemeine Lösung lautet

$$u(\xi) = c_1 F\left(\alpha, \nu + \frac{1}{2}, \xi\right) + c_2 F\left(\alpha - \nu + \frac{1}{2}, \frac{3}{2} - \nu; \xi\right) \xi^{1/2-\nu},$$

wobei mit α der Ausdruck in der eckigen Klammer der Gleichung (1) bezeichnet wurde.

Aus der Beschränktheit von $\psi(0)$ folgt

$$c_2 = 0.$$

Ferner muß gefordert werden, daß die Wellenfunktion für $x \to \infty$ abnimmt, d. h., daß sich die Funktion $u(\xi)$ auf ein Polynom reduziert. Das ist der Fall, wenn man $\alpha = -n$ setzt ($n = 0, 1, 2, \ldots$). Man findet die Energieniveaus

$$E_n = \frac{2\hbar}{a} \sqrt{\frac{2V_0}{\mu}} \left\{ n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}} \right) \right\}.$$

Man erhält also (bei geeigneter Wahl des Energienullpunktes) das Energiespektrum des Oszillators mit der Kreisfrequenz $\omega = \sqrt{\frac{8V_0}{\mu a^2}}$. Interessant ist die Feststellung, daß die Nullpunktsenergie eines Teilchens im Potential $V_0 \left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a}\right)^2$ stets größer als die Nullpunktsenergie des entsprechenden Oszillators ist. Die Wellenfunktionen besitzen die Form

$$\psi_n = c_n x^\nu \exp\left[-\sqrt{\frac{\mu V_0}{2\hbar^2 a^2}}\, x^2\right] F\left(-n, \nu + \frac{1}{2}; \sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 a^2}}\, x^2\right),$$

wobei $\nu = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} + 1\right)$ ist und die Konstanten c_n aus der Normierungsbedingung bestimmt werden können.

1.12. In die Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \left(E + \frac{V_0}{\cosh^2 \frac{x}{a}}\right) \psi = 0$$

gehen wir mit dem Ansatz

$$\psi = \left(\cosh \frac{x}{a}\right)^{-2\lambda} u, \quad \lambda = \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - 1\right)$$

ein. Für u ergibt sich die Gleichung

$$\frac{d^2u}{dx^2} - \frac{4\lambda}{a}\tanh\left(\frac{x}{a}\right)\frac{du}{dx} + \frac{4}{a^2}(\lambda^2 - \varkappa^2)\,u = 0$$

mit

$$\varkappa = \sqrt{-\frac{\mu E a^2}{2\hbar^2}}$$

(wir betrachten das diskrete Spektrum $E < 0$).

Führt man die unabhängige Variable

$$z = -\sinh^2\frac{x}{a}$$

ein, so führt die Gleichung auf die hypergeometrische Differentialgleichung

$$z(1-z)\frac{d^2u}{dz^2} + \left[\frac{1}{2} - (1-2\lambda)\,z\right]\frac{du}{dz} - (\lambda^2 - \varkappa^2)\,u = 0. \tag{1}$$

Die in die allgemeine hypergeometrische Differentialgleichung

$$z(1-z)\frac{d^2u}{dz^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)\,z]\frac{du}{dz} - \alpha\beta u = 0$$

eingehenden Parameter α, β, γ sind im vorliegenden Fall

$$\gamma = \frac{1}{2}, \quad \alpha = \varkappa - \lambda, \quad \beta = -\varkappa - \lambda.$$

Die zwei Lösungen der Gleichung (1), welche gerade bzw. ungerade Wellenfunktionen ψ liefern, sind

$$u_1 = F\left(-\lambda + \varkappa,\ -\lambda - \varkappa,\ \frac{1}{2};\ z\right), \tag{2}$$

$$u_2 = \sqrt{z}\,F\left(-\lambda + \varkappa + \frac{1}{2},\ -\lambda - \varkappa + \frac{1}{2},\ \frac{3}{2};\ z\right). \tag{3}$$

Diese Lösungen führen zu beschränkten Werten der Wellenfunktionen für $x = 0$ $(z = 0)$.

Damit die Wellenfunktion

$$\psi = \left(\cosh\frac{x}{a}\right)^{-2\lambda} u$$

für $x \to \pm\infty$ $(z \to -\infty)$ verschwindet, müssen sich die hypergeometrischen Funktionen in (2) und (3) auf Polynome reduzieren. Diese Bedingung bedeutet z. B. für u_1, daß entweder $\lambda - \varkappa$ oder $\lambda + \varkappa$ ganze nichtnegative

Zahlen sind. Der zweite Fall ist jedoch auszuschließen, da die Wellenfunktion dann für $x \to \pm\infty$ exponentiell anwachsen würde. Man erhält also $\lambda - \varkappa = k$ ($k = 0, 1, 2, \ldots$), und die Energieniveaus ergeben sich zu

$$E_k = -\frac{\hbar^2}{2\mu\, a^2}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\mu\, V_0\, a^2}{\hbar^2} + 1} - 2k - \frac{1}{2}\right]^2.$$

Analog findet man für den Ausdruck (3), daß die Bedingung der Endlichkeit der Wellenfunktion für $x \to \pm\infty$ erfüllt ist, wenn gilt

$$\lambda - \varkappa - \frac{1}{2} = l \quad (l = 0, 1, 2, \ldots).$$

Daraus folgt

$$E_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu\, a^2}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\mu\, V_0\, a^2}{\hbar^2} + 1} - (2l + 1) - \frac{1}{2}\right]^2.$$

Faßt man diese Ausdrücke zusammen, so kann man schreiben

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu\, a^2}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\mu\, V_0\, a^2}{\hbar^2} + 1} - \left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^2 \quad (n = 0, 1, 2, \ldots).$$

Die Zahl der diskreten Niveaus ist gleich der größten ganzen Zahl N, die der Ungleichung

$$N < \frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\mu\, V_0\, a^2}{\hbar^2} + 1} - \frac{1}{2}$$

genügt.

Das erhaltene Energiespektrum stimmt bei geeigneter Wahl der Parameter mit dem Spektrum für das MORSE-Potential überein (vgl. Aufgabe 8.11.).

1.13. In die Wellengleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} - \left(E - V_0 \cot^2 \frac{\pi}{a} x\right)\psi = 0$$

setzen wir

$$\psi = \left(\sin \frac{\pi}{a} x\right)^{-2\lambda} u$$

ein. Mit den Bezeichnungen

$$\lambda = \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\pi^2\hbar^2} + 1} - 1\right),$$

$$\nu = \sqrt{\frac{\mu a^2}{2\hbar^2\pi^2}(E + V_0)}$$

erhält man folgende Gleichung für u:

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 4\frac{\pi}{a}\lambda \cot\left(\frac{\pi x}{a}\right)\frac{du}{dx} + \frac{4\pi^2}{a^2}(\nu^2 - \lambda^2)u = 0.$$

Durch Einführung der unabhängigen Variablen $z = \cos^2 \pi x/a$ erhält man die hypergeometrische Differentialgleichung

$$z(1 - z)\frac{d^2u}{dz^2} + \left[\frac{1}{2} - (1 - 2\lambda)z\right]\frac{du}{dz} + (\nu^2 - \lambda^2)u = 0. \tag{1}$$

Vergleicht man diese mit der allgemeinen Form der hypergeometrischen Differentialgleichung

$$z(1 - z)\frac{d^2u}{dz^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)z]\frac{du}{dz} - \alpha\beta u = 0,$$

so findet man für die Parameter

$$\gamma = \tfrac{1}{2}, \quad \alpha = -\nu - \lambda, \quad \beta = \nu - \lambda$$

Die Gl. (1) besitzt zwei Lösungen, von denen eine für $z = 0$ (diesem Wert entspricht $x = a/2$) von Null verschieden und endlich ist:

$$u_1 = F\left(-\nu - \lambda,\ \nu - \lambda,\ \frac{1}{2};\ z\right),$$

während die zweite Lösung

$$u_2 = \sqrt{z}\,F\left(-\nu - \lambda + \frac{1}{2},\ \nu - \lambda + \frac{1}{2}, \frac{3}{2};\ z\right)$$

für $z = 0$ $(x = a/2)$ verschwindet. Bei der Untersuchung des Verhaltens der Lösungen für $z = 1$ (dieser Wert entspricht den beiden Werten $x = 0$ und $x = a$) benutzen wir die Beziehung

$$F(\alpha, \beta, \gamma; z) = (1 - z)^{-\alpha} F\left(\alpha, \gamma - \beta, \gamma; \frac{z}{z - 1}\right).$$

Für u_1 und u_2 folgt damit

$$u_1 = (1 - z)^{\nu+\lambda} F\left(-\nu - \lambda, -\nu + \lambda + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{z}{z-1}\right), \tag{2}$$

$$u_2 = \sqrt{z}(1 - z)^{\nu+\lambda-1/2} F\left(-\nu - \lambda + \frac{1}{2}, -\nu + \lambda + 1, \frac{3}{2}; \frac{z}{z-1}\right). \tag{3}$$

Damit die Bedingung, daß die Wellenfunktion ψ für $x = 0$ und $x = a$ verschwindet, erfüllt ist, muß die Potenzreihe in $z/(z - 1)$ aus einer endlichen Zahl von Termen bestehen.

Die hypergeometrische Reihe im Ausdruck (2) für u_1 bricht ab, wenn entweder $\nu + \lambda$ oder $\nu - \lambda - 1/2$ eine ganze positive Zahl oder Null ist. Der Bedingung $\psi = 0$ für $x = 0$, $x = a$ genügt aber nur der zweite Fall

$$\nu - \lambda - \frac{1}{2} = k \quad (k = 0, 1, 2, \ldots).$$

Die Energieniveaus ergeben sich zu

$$E_k = [(2k + 1)^2 + 4(2k + 1)\lambda - 2\lambda]\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}. \tag{4}$$

Die analoge Untersuchung des Ausdruckes (3) zeigt, daß die Energieniveaus durch die Bedingung

$$\nu - \lambda = l \quad (l = 1, 2, 3, \ldots) \tag{5}$$

bestimmt werden.

Die Formeln für die Energieniveaus (4) und (5) lassen sich zusammenfassen:

$$E_n = (n^2 + 4n\lambda - 2\lambda)\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots).$$

Dabei entsprechen die Wellenfunktionen

$$\psi_n = c_n\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^{-2\lambda} F\left(-\frac{n}{2} - 2\lambda, \frac{n}{2}, \frac{1}{2}; \cos^2\frac{\pi x}{a}\right)$$

ungeraden Werten von n und die Wellenfunktionen

$$\psi_n = c_n\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^{-2\lambda} \cos\frac{\pi x}{a} F\left(-\frac{n}{2} - 2\lambda + \frac{1}{2}, \frac{n}{2} + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; \cos^2\frac{\pi x}{a}\right)$$

geraden Werten von n.

Die normierte Wellenfunktion des Grundzustandes lautet

$$\psi = \sqrt{\frac{\pi\Gamma(2\lambda + 1)}{a\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(2\lambda + \frac{3}{2}\right)}}\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^{2\lambda+1}, \quad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}.$$

Der Grenzfall $V_0 \to 0$ führt auf das Problem eines Teilchens im Potentialkasten (vgl. Aufgabe 1.1.). Die Größe λ wird Null, und für die Energieniveaus folgt erwartungsgemäß

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu\, a^2}\, n^2.$$

Im entgegengesetzten Fall $\lambda \gg 1$ erhält man für die niedrigen Niveaus ($n \ll \lambda$)

$$E_n = \hbar\omega\left(n - \frac{1}{2}\right) \quad (n = 1, 2, \ldots)$$

mit

$$\omega = \frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{\mu}}.$$

Dieses Ergebnis folgt auch, wenn man die potentielle Energie in der Umgebung des Punktes $x = a/2$ entwickelt und sich auf quadratische Terme beschränkt.

1.14. Im betrachteten Fall existiert nur ein kontinuierliches Energiespektrum, und die Eigenfunktionen sind nicht entartet.

Wir gehen in der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} - (E + Fx)\,\psi = 0$$

von der Orts- zur Impulsdarstellung über:

$$\frac{p^2}{2\mu}\, a(p) - Ea(p) = i\hbar F\frac{d\,a(p)}{dp}.$$

Die zum Eigenwert E gehörende Lösung

$$a_E(p) = c\exp\left[-\frac{i}{\hbar F}\left(\frac{p^3}{6\mu} - Ep\right)\right]$$

dieser Gleichung ist die Wellenfunktion in der Impulsdarstellung. Wir normieren die Funktion $a(p)$ auf $\delta(E - E')$:

$$\int a_E^*(p)\, a_{E'}(p)\, dp = \delta(E - E'),$$

d. h.

$$cc^* \int \exp\left[-\frac{ip}{\hbar F}(E - E')\right] dp = cc^* \cdot 2\pi\hbar F \delta(E - E') = \delta(E - E'),$$

woraus folgt

$$c = \frac{1}{\sqrt{2\pi\, \hbar F}}.$$

Die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung lautet

$$\psi(x) = \frac{\alpha}{2\pi \sqrt{F}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[i\left(\frac{u^3}{3} - uq\right)\right] du$$

$$= \frac{\alpha}{\pi \sqrt{F}} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{u^3}{3} - uq\right) du,$$

$$q = \left(x + \frac{E}{F}\right)\alpha, \quad \alpha = \left(\frac{2\mu F}{\hbar^2}\right)^{1/3}.$$

Das Integral kann durch die AIRYsche Funktion $\Phi(q)$ ausgedrückt werden:

$$\Phi(q) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{u^3}{3} + uq\right) du, \quad \psi(x) = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi F}} \Phi(-q).$$

1.15. Für das vorgegebene Potential lautet der HAMILTON-Operator

$$H = \frac{1}{2\mu} p^2 + \frac{1}{2} V_0 \exp\left(b\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) + \frac{1}{2} V_0 \exp\left(-b\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right).$$

Wegen

$$\exp\left(b\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) a(p) = a(p + b\hbar)$$

läßt sich die SCHRÖDINGER-Gleichung als Differenzengleichung schreiben:

$$\frac{1}{2\mu} p^2 a(p) + \frac{1}{2} V_0 a(p + b\hbar) + \frac{1}{2} V_0 a(p - b\hbar) = E a(p).$$

1.16.

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 a(k) + \sum_{-\infty}^{+\infty} V_n a\left(k + \frac{2\pi n}{b}\right) = E a(k),$$

$$k = \frac{p}{\hbar}, \quad V(x) = \sum_{-\infty}^{+\infty} V_n \exp\left(-\frac{2\pi n i x}{b}\right), \quad V_n = V_{-n}^*.$$

1.17. Die Wellenfunktion lautet im Gebiet $0 < x < a$ des Topfes

$$\psi = c_1 \exp(i\varkappa_1 x) + c_2 \exp(-i\varkappa_1 x), \quad \varkappa_1 = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}$$

und im Gebiet $-b < x < 0$ der Schwelle

$$\psi = c_3 \exp(i\varkappa_2 x) + c_4 \exp(-i\varkappa_2 x), \quad \varkappa_2 = \frac{\sqrt{2\mu(E - V_0)}}{\hbar}.$$

Wegen $\psi(x) = \text{const}\, \psi(x + l)$ (die Konstante ist dem Betrage nach 1, ferner ist $l = a + b$) folgt für das Gebiet der nächstfolgenden Schwelle $a < x < a + b$

$$\psi = e^{ikl}\{c_3 \exp[i\varkappa_2(x - l)] + c_4 \exp[-i\varkappa_2(x - l)]\}.$$

Aus der Stetigkeitsforderung an die Wellenfunktion und ihre erste Ableitung in den Punkten $x = 0$ und $x = a$ resultieren vier Gleichungen:

$$c_1 + c_2 = c_3 + c_4,$$

$$c_1 e^{i\varkappa_1 a} + c_2 e^{-i\varkappa_1 a} = e^{ikl}(c_3 e^{-i\varkappa_2 b} + c_4 e^{i\varkappa_2 b}),$$

$$\varkappa_1(c_1 - c_2) = \varkappa_2(c_3 - c_4),$$

$$\varkappa_1(c_1 e^{i\varkappa_1 a} - c_2 e^{-i\varkappa_1 a}) = \varkappa_2(c_3 e^{-i\varkappa_2 b} - c_4 e^{i\varkappa_2 b}) e^{ikl}.$$

Dieses Gleichungssystem besitzt nur für

$$\cos kl = \cos \varkappa_1 a \cos \varkappa_2 b - \frac{\varkappa_1^2 + \varkappa_2^2}{2\varkappa_1 \varkappa_2} \sin \varkappa_1 a \sin \varkappa_2 b \tag{1}$$

eine nichttriviale Lösung.

Wir betrachten zwei Fälle:

a) $E < V_0$, $\varkappa_2$ imaginär.

Schreibt man $\varkappa_2 = i\varkappa$, so ergibt sich aus der Gl. (1)

$$\cos kl = \cos \varkappa_1 a \cosh \varkappa b + \frac{\varkappa^2 - \varkappa_1^2}{2\varkappa_1 \varkappa} \sin \varkappa_1 a \sinh \varkappa b. \tag{2}$$

Die Bereiche erlaubter Energien sind daher durch

$$-1 \leqq \cos \varkappa_1 a \cosh \varkappa b + \frac{\varkappa^2 - \varkappa_1^2}{2\varkappa_1 \varkappa} \sin \varkappa_1 a \sinh \varkappa b \leqq 1$$

festgelegt. Zur Klärung der allgemeinen Gesetzmäßigkeiten für die Lage der erlaubten Bänder betrachten wir den Grenzfall

$$\frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar} b \ll 1, \quad a \gg b, \quad E \ll V_0.$$

Mit der Abkürzung $\frac{\mu V_0}{\hbar^2} ab = \gamma$ lautet die Gl. (2) in dieser Näherung

$$\cos ka = \gamma \frac{\sin \varkappa_1 a}{\varkappa_1 a} + \cos \varkappa_1 a. \tag{3}$$

Abb. 19 zeigt die Funktion

$$\gamma \frac{\sin \varkappa_1 a}{\varkappa_1 a} + \cos \varkappa_1 a$$

in Abhängigkeit von $\varkappa_1 a$. Die erlaubten Energiebänder sind auf der Abszissenachse durch fette Linien gekennzeichnet.

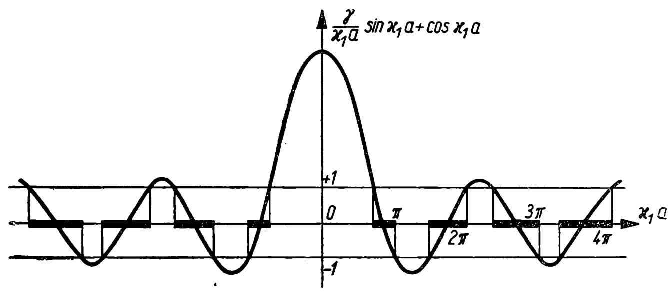


Abb. 19

An jeden Punkt $\varkappa_1 a = n\pi$ schließt sich rechtsseitig ein Bereich verbotener Energie an. Wie aus der Abbildung hervorgeht, werden die verbotenen Energiebänder mit zunehmender Bandnummer immer enger. Die Breiten der verbotenen Bänder lassen sich leicht abschätzen. Die linke Seite der Gl. (3) wird gleich $(-1)^n$, falls

$$\cos(\varkappa_1 a - \varphi) = (-1)^n \cos \varphi, \quad \tan \varphi = \frac{\gamma}{\varkappa_1 a},$$

d. h. $\varkappa_1 a = n\pi$ und $\varkappa_1 a = n\pi + 2\varphi$ ist. Hieraus folgt, daß die Breite der verbotenen Bänder gleich 2φ ist. Für große n gilt

$$2\varphi \approx \frac{\gamma}{n\pi}.$$

b) $E > V_0$. In diesem Fall ergeben sich die Energiebänder aus den Ungleichungen

$$-1 \leqq \cos\varkappa_1 a \cos\varkappa_2 b - \frac{\varkappa_1^2 + \varkappa_2^2}{2\varkappa_1 \varkappa_2} \sin\varkappa_1 a \sin\varkappa_2 b \leqq +1.$$

1.18. Die Energieniveaus E_n folgen aus der BOHRschen Quantenbedingung

$$\int_{x_1}^{x_2} p\,dx = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar \tag{1}$$

mit

$$p = \sqrt{2\mu\left(E_n + V_0 \cosh^{-2}\frac{x}{a}\right)}.$$

Dabei sind x_1 und x_2 die durch die Bedingung $p = 0$ definierten Umkehrpunkte, und für den betrachteten Fall des diskreten Spektrums gilt $E_n < 0$. Wir berechnen das Integral

$$I(E) = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2\mu\left(E + V_0 \cosh^{-2}\frac{x}{a}\right)}\,dx,$$

indem wir beiderseits nach E differenzieren. Dabei wird die Ableitung des Integrals nach der oberen und unteren Grenze Null, da der unter dem Wurzelzeichen stehende Ausdruck in den Punkten x_1 und x_2 verschwindet.

Es gilt also

$$\frac{dI}{dE} = \mu \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{2\mu\left(E + V_0 \cosh^{-2}\frac{x}{a}\right)}}.$$

Mit $z = \sinh x/a$ erhält man für dieses Integral

$$\frac{dI}{dE} = \mu a \int_{z_1}^{z_2} \frac{dz}{\sqrt{2\mu[E(1 + z^2) + V_0]}} = \frac{\mu a}{\sqrt{-2\mu E}}\,\pi.$$

Hieraus folgt

$$I(E) = -\pi\sqrt{-2\mu a^2 E} + C.$$

Die Konstante C ergibt sich aus der Bedingung, daß das Integrationsgebiet sich für $E = -V_0$ auf einen Punkt zusammenzieht:

$$I(-V_0) = 0.$$

Es ist also

$$I(E) = \sqrt{2\mu a^2}(\sqrt{V_0} - \sqrt{-E})\,\pi.$$

In quasiklassischer Näherung erhält man somit die Energieniveaus

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\sqrt{\frac{2\mu a^2 V_0}{\hbar^2}} - \left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^2 \quad (n = 0, 1, 2, \ldots). \tag{2}$$

Die Zahl der Niveaus ist

$$N = \frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar}\,a.$$

Die Berechnung der Energieniveaus mit Hilfe der Quantenbedingungen (1) ist gerechtfertigt, wenn die Zahl der Niveaus groß ist, d. h. für

$$\frac{2\mu a^2 V_0}{\hbar^2} \gg 1.$$

Ist diese Bedingung erfüllt, so stimmt der Ausdruck (2) für die Energieniveaus mit der in der Aufgabe 1.12. berechneten exakten Formel für E_n überein.

1.19.

1.19.1. $E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \ldots).$

1.19.2.

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\sqrt{\frac{2\mu a^2 V_0}{\pi^2\hbar^2}} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^2 - V_0 \quad (n = 0, 1, 2, \ldots).$$

1.20. Der Mittelwert der kinetischen Energie im stationären Zustand ψ_n (die Wellenfunktion wird dabei als reell angenommen) ist gegeben durch

$$\overline{T} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\int \psi_n \frac{d^2\psi_n}{dx^2}\,dx = \frac{\hbar^2}{2\mu}\int \left(\frac{d\psi_n}{dx}\right)^2 dx.$$

In quasiklassischer Näherung erhält man für das klassisch erreichbare Gebiet ($a < x < b$) die Wellenfunktion

$$\psi_n = \frac{A_n}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right), \quad p = \sqrt{2\mu(E_n - V)},$$

woraus folgt

$$\frac{d\psi_n}{dx} = -\frac{\sqrt{p}}{\hbar} A_n \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)$$

$$- \frac{1}{2}\frac{A_n}{p^{3/2}}\frac{dp}{dx}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right).$$

Man setzt diesen Ausdruck in das Integral für $\overline{T}$ ein und kann sich bei der Integration auf das klassisch erreichbare Gebiet beschränken, da ψ_n außerhalb dieses Gebietes exponentiell abnimmt. Ersetzt man die Quadrate der stark oszillierenden trigonometrischen Funktionen durch ihren Mittelwert $^1/_2$ und vernachlässigt das Integral, das den oszillierenden Faktor

$$\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{2}\sin\left(\frac{2}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{2}\right)$$

enthält, so folgt

$$\overline{T} = \frac{A_n^2}{4\mu}\int_a^b\left[p + \frac{\hbar^2}{4p^3}\left(\frac{dp}{dx}\right)^2\right]dx.$$

Die Bedingung

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| = \frac{\hbar}{p^2}\left|\frac{dp}{dx}\right| \ll 1$$

für die Anwendbarkeit der quasiklassischen Näherung bedeutet, daß der zweite Term unter dem Integralzeichen klein gegen den ersten sein muß. Unter Benutzung der Quantenbedingung findet man deshalb

$$\overline{T} = \frac{A_n^2}{4\mu}\int_a^b p\,dx = \frac{A_n^2}{4\mu}\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Die Konstante A_n folgt aus der Normierungsbedingung

$$\int \psi_n^2\,dx \approx A_n^2\int_a^b \frac{1}{p}\cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx - \frac{\pi}{4}\right)dx \approx \frac{A_n^2}{2}\int_a^b\frac{dx}{p} = 1.$$

Differenziert man andererseits die Quantenbedingung

$$\int_a^b p\,dx = \int_a^b \sqrt{2\mu\,(E_n - V_0)}\,dx = \pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

nach n, so erhält man

$$\mu \frac{dE_n}{dn} \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_n - V)}} = \mu \frac{dE_n}{dn} \int_a^b \frac{dx}{p} = \pi\hbar,$$

woraus folgt

$$A_n^2 = \frac{2\mu}{\pi\hbar} \frac{dE_n}{dn}.$$

Mit Berücksichtigung der letzten Gleichung ergibt sich für die mittlere kinetische Energie der Ausdruck

$$\overline{T} = \frac{1}{2} \frac{dE_n}{dn} \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

1.21.

1.21.1. $\overline{T} = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right).$

1.21.2. $\overline{T} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \left[\sqrt{\frac{2\mu\, a^2 V_0}{\pi^2\hbar^2}} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\right] \left(n + \frac{1}{2}\right).$

1.22. Aus dem Virialsatz folgt

$$2\overline{T} = \nu \overline{V},$$

mithin gilt

$$E = \frac{2 + \nu}{\nu} \overline{T}.$$

Setzt man in diese Beziehung die mittlere kinetische Energie

$$\overline{T} = \frac{1}{2} \frac{dE_n}{dn} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

ein (vgl. die vorige Aufgabe), so erhält man die Gleichung

$$E = \frac{2 + \nu}{2\nu} \frac{dE}{dn} \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

mit der Lösung

$$E = \text{const} \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)^{\frac{2\nu}{2+\nu}}.$$

Zur Bestimmung der Konstanten benutzen wir die Quantenbedingung

$$I(E) = 2\int_0^{x_0} \sqrt{2\mu(E - ax^\nu)}\, dx = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right),$$

aus der wir

$$\frac{dI}{dE} = \sqrt{\frac{2\mu}{E}} \int_0^{x_0} \frac{dx}{\sqrt{1 - \frac{a}{E} x^\nu}}$$

erhalten. Wir berechnen das Integral mit Hilfe der Substitution $u = \frac{a}{E} x^\nu$:

$$\frac{dI}{dE} = \frac{1}{\nu} \sqrt{\frac{2\mu}{E}} \left(\frac{E}{a}\right)^{\frac{1}{\nu}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu}\right)}.$$

Daraus folgt

$$I(E) = c_\nu E^{\frac{1}{\nu} - \frac{1}{2}}, \quad c_\nu = \frac{\sqrt{2\mu}}{\nu a^{\frac{1}{\nu}}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu}\right)}.$$

Es ergibt sich

$$\text{const} = \left[\frac{\sqrt{\pi}\hbar\nu a^{\frac{1}{\nu}} \Gamma\left(\frac{3}{2} + \frac{1}{\nu}\right)}{\sqrt{2\mu}\, \Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right)}\right]^{\frac{2\nu}{2+\nu}}$$

Insbesondere erhalten wir für $\nu = 2$, $a = \frac{\mu\omega^2}{2}$

$$E = \hbar\omega(n + {}^1/_2).$$

Für $\nu \to \infty$ ergibt sich das Spektrum eines Rechtecktopfes. Dabei muß jedoch in der Quantenbedingung $n + {}^1/_2$ durch $n + 1$ ersetzt werden.

1.23. Als Ausgangsgleichung dient die Bohrsche Quantenbedingung

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2\mu\,[E - V(x)]}\, dx = \pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

die bei vorgegebener potentieller Energie $V(x)$ das Spektrum (genauer $n(E)$) bestimmt. Da $V(x)$ nach Voraussetzung eine gerade Funktion ist, folgt

$$2\int_0^a \sqrt{2\mu\,[E - V(x)]}\, dx = \pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{1}$$

mit $x_2 = -x_1 = a$, $E = V(a)$.

Die Aufgabe läuft also darauf hinaus, die Lösung der Integralgleichung (1) zu finden. Sie lautet[1])

$$x(V) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \int_{E_0}^{V} \frac{dE}{\frac{dE}{dn}\sqrt{V - E}}.$$

Dabei ist $x(V)$ die Umkehrfunktion von $V(x)$, $\frac{dE}{dn}$ wird als Funktion von E betrachtet, und E_0 ist die Nullpunktsenergie.

1.24. Aus der SCHRÖDINGER-Gleichung folgt, daß ψ'' eine Singularität der Form $\delta(x)$ besitzt. Daher hat ψ' an der Stelle $x = 0$ einen Sprung, und ψ ist stetig. Integrieren wir die Gleichung in der Umgebung des Punktes $x = 0$, so finden wir

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \{\psi'(+0) - \psi'(-0)\} = q\psi(0).$$

Daraus ergibt sich die normierte Wellenfunktion des Grundzustandes

$$\psi = \sqrt{\varkappa}\, \mathrm{e}^{-\varkappa|x|}, \quad \varkappa = \frac{\mu q}{\hbar^2}.$$

Die Bindungsenergie ist

$$E = -\frac{\hbar^2 \varkappa^2}{2\mu} = -\frac{\mu q^2}{2\hbar^2}.$$

Dieses Ergebnis kann verallgemeinert werden. Haben wir es mit einem solchen Potentialtopf zu tun, daß es erstens nur einen gebundenen Zustand mit einer Energie $|E| \ll |V|$ gibt und zweitens die Abmessung a des Gebietes, in dem das Potential wesentlich von Null verschieden ist, klein gegen die Länge ist, über die sich die Funktion ψ wesentlich ändert, so kann $V(x)$ durch das äquivalente Potential $-q\delta(x)$ mit $q = -\int_{-\infty}^{+\infty} V(x)\, dx$ ersetzt werden.

Beide Bedingungen führen auf dieselbe Forderung

$$|V| \ll \frac{\hbar^2}{\mu a^2}.$$

---

[1]) Die Aufgabe hängt eng mit dem Problem der klassischen Mechanik zusammen, die potentielle Energie eines Teilchens aus der vorgegebenen Schwingungsperiode als Funktion der Teilchenenergie zu bestimmen (vgl. LANDAU und LIFSCHIZ: Mechanik, Akademie-Verlag, Berlin 1962, wo die Lösung dieses Problems angegeben wird).

Dann gibt es nur einen gebundenen Zustand mit der Energie

$$E = -\frac{\mu}{2\hbar^2}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} V(x)\,dx\right)^2.$$

2. DURCHGANG DURCH EINE POTENTIALSCHWELLE

2.1. Im Metall ($x < 0$) besitzt die zum Eigenwert E gehörende Wellenfunktion die allgemeine Form

$$\psi_{\mathrm{I}} = b\,\mathrm{e}^{i\varkappa x} + c\,\mathrm{e}^{-i\varkappa x}, \quad \varkappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu(E + V_0)}.$$

Im Gebiet $x > 0$ hat die Eigenfunktion die Form einer aus dem Metall auslaufenden Welle:

$$\psi_{\mathrm{II}} = a\,\mathrm{e}^{ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu\,E}.$$

Am Metallrand müssen die Wellenfunktionen ψ_{I} und ψ_{II} sowie ihre Ableitungen stetig sein:

$$\psi_{\mathrm{II}}(0) = \psi_{\mathrm{I}}(0), \quad a = b + c,$$

$$\psi'_{\mathrm{II}}(0) = \psi'_{\mathrm{I}}(0), \quad ak = (b - c)\,\varkappa.$$

Das Verhältnis der Stromdichte der reflektierten Welle zur Stromdichte der einfallenden Welle ist gleich dem Reflexionskoeffizienten:

$$R_0 = \left(\frac{\varkappa - k}{\varkappa + k}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E + V_0} - \sqrt{E}}{\sqrt{E + V_0} + \sqrt{E}}\right)^2 = \frac{V_0^2}{(\sqrt{E + V_0} + \sqrt{E})^4}.$$

Der Reflexionskoeffizient ist gleich 1 für die Elektronenenergie $E = 0$, nimmt mit wachsender Energie stark ab und beträgt für $E \gg V_0$

$$R_0 \approx \frac{V_0^2}{16E^2}.$$

Im Grenzfall $E \ll V_0$ wird

$$R_0 \approx 1 - 4\sqrt{\frac{E}{V_0}}.$$

Für normale Metalle gilt $V_0 \approx 10$ eV. In diesem Fall hat der Reflexionskoeffizient für Elektronen mit einer Energie von $E = 0{,}1$ eV den Wert

$$R_0 = 0{,}67.$$

2.2. In der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi'' - [E + V_0(e^{x/a} + 1)^{-1}]\psi = 0 \tag{1}$$

setzen wir

$$\xi = -e^{-x/a}, \quad \psi = \xi^{-ika}u(\xi) \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}.$$

Für die Funktion $u(\xi)$ ergibt sich die hypergeometrische Differentialgleichung

$$\xi(1-\xi)u'' + (1-2ika)(1-\xi)u' - \varkappa_0^2 a^2 u = 0$$

mit

$$\varkappa_0 = \frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar}.$$

Die Lösung der Gl. (1), die für $x \to \infty$ ($\xi \to 0$) endlich ist und asymptotisch eine laufende Welle $c\, e^{ikx}$ darstellt, lautet

$$\psi = c\, e^{ikx} F\{i(\varkappa - k)a, \quad -i(\varkappa + k)a, \quad 1 - 2ika; \; -e^{-x/a}\}$$

$$\left(\varkappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu(E + V_0)}\right).$$

Um den Reflexionskoeffizienten berechnen zu können, muß man die Form der Wellenfunktion im Innern des Metalls bestimmen ($x \to -\infty$):

$$\psi \approx c\,\frac{\Gamma(1-2ika)\;\Gamma(-2ika)}{\Gamma(-i(\varkappa + k)a)\,\Gamma(1 - i(k+\varkappa)a)}\,e^{i\varkappa x} + c\,\frac{\Gamma(1-2ika)\,\Gamma(2ika)}{\Gamma(i(\varkappa - k)a)\,\Gamma(1 + i(\varkappa - k)a)}\,e^{-i\varkappa x}.$$

Damit ergibt sich der Reflexionskoeffizient zu

$$R_a = \left|\frac{\Gamma(2ika)\,\Gamma[-i(\varkappa + k)a]\,\Gamma[1 - i(\varkappa + k)a]}{\Gamma(-2ika)\,\Gamma[i(\varkappa - k)a]\,\Gamma[1 + i(\varkappa - k)a]}\right|^2 = \frac{\sinh^2 \pi a(\varkappa - k)}{\sinh^2 \pi a(\varkappa + k)}.$$

Bei der Berechnung von R_a benutzt man die folgenden Beziehungen:

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z),$$

$$\Gamma(z)\,\Gamma(1-z) = \pi/\sin \pi z,$$

$$\Gamma^*(ix) = \Gamma(-ix)$$

(x ist eine reelle ganze Zahl). Für $a \to 0$ folgt die Formel für den Reflexionskoeffizienten R_0 im Falle einer rechteckigen Potentialstufe (vgl. die vorige Aufgabe).

Man überzeugt sich leicht von der Gültigkeit der Ungleichung $R_a < R_0$. Der Reflexionskoeffizient ist also bei stetiger Änderung des Potentials kleiner als bei sprunghafter Änderung. Für $a = 1$ Å, $V_0 = 10$ eV und $E = 0{,}1$ eV findet man $R_a = 0{,}23$.

2.3. Wir betrachten einen Strom von Teilchen der Energie $E < V_0$, die sich von links nach rechts bewegen. Im Gebiet III wird die Wellenfunktion durch die laufende Welle

$$\psi_{\text{III}} = C\,\mathrm{e}^{ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu E}$$

dargestellt. Im Gebiet I sind eine einfallende und eine reflektierte Welle vorhanden:

$$\psi_{\text{I}} = \mathrm{e}^{ikx} + A\,\mathrm{e}^{-ikx}.$$

Im Gebiet II ist die allgemeine Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_{\text{II}}'' - (E - V_0)\,\psi_{\text{II}} = 0$$

von der Form

$$\psi_{\text{II}} = B_1\,\mathrm{e}^{\varkappa x} + B_2\,\mathrm{e}^{-\varkappa x}, \quad \varkappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0 - E)}.$$

Die Koeffizienten A, B_1, B_2 und C resultieren aus der Stetigkeitsbedingung für die Wellenfunktion und ihre erste Ableitung.

Für $x = 0$ folgen aus diesen Bedingungen die Beziehungen

$$1 + A = B_1 + B_2, \qquad ik(1 - A) = \varkappa(B_1 - B_2).$$

Analog ergibt sich für $x = a$

$$B_1\,\mathrm{e}^{\varkappa a} + B_2\,\mathrm{e}^{-\varkappa a} = C\,\mathrm{e}^{ika}, \quad \varkappa(B_1\,\mathrm{e}^{\varkappa a} - B_2\,\mathrm{e}^{-\varkappa a}) = ikC\,\mathrm{e}^{ika}.$$

Aus diesen Gleichungen folgt

$$A = C\frac{k^2 + \varkappa^2}{4ik\varkappa}\,\mathrm{e}^{ika}(\mathrm{e}^{\varkappa a} - \mathrm{e}^{-\varkappa a}) = C\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\,\frac{\mathrm{e}^{\varkappa a} - \mathrm{e}^{-\varkappa a}}{4ik\varkappa}\,\mathrm{e}^{ika},$$

$$B_1 = \frac{C}{2}\left(1 + \frac{ik}{\varkappa}\right)\mathrm{e}^{ika - \varkappa a},$$

$$B_2 = \frac{C}{2}\left(1 - \frac{ik}{\varkappa}\right)\mathrm{e}^{ika + \varkappa a},$$

$$C = -\frac{4ik}{\varkappa}\,\frac{\mathrm{e}^{-ika}}{\mathrm{e}^{\varkappa a}\left(1 - \dfrac{ik}{\varkappa}\right)^2 - \mathrm{e}^{-\varkappa a}\left(1 + \dfrac{ik}{\varkappa}\right)^2}.$$

Da die einfallende Welle in ψ_I gleich e^{ikx} angenommen wurde, ist die Durchlässigkeit durch

$$D = CC^*$$

gegeben. Man erhält

$$D = \frac{4k^2\varkappa^2}{(k^2 + \varkappa^2)\sinh^2 \varkappa a + 4k^2\varkappa^2}.$$

Wir merken an, daß die Durchlässigkeit für $\hbar \to 0$ (Übergang zur klassischen Mechanik) gegen Null strebt.

Für $\varkappa a \gg 1$, d. h. $V_0 - E \gg \hbar^2/2\mu a^2$, nimmt der Ausdruck für die Durchlässigkeit eine besonders einfache Form an:

$$D \approx 16 \frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right) \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0 - E)}\, a\right].$$

Wir betrachten zwei konkrete Beispiele:

a) Ein Elektron mit der Energie $E = 1$ eV durchdringt eine Potentialschwelle mit $V_0 = 2$ eV und $a = 1$ Å. Für D erhält man den Wert 0,777.

b) Auf dieselbe Potentialschwelle möge ein Proton mit der gleichen Energie auftreffen. In diesem Fall erhält man die außerordentlich kleine Durchlässigkeit $D = 3{,}6 \cdot 10^{-19}$.

2.4.

$$R = \frac{(k^2 - \varkappa^2)\sin^2 \varkappa a}{4k^2\varkappa^2 + (k^2 - \varkappa^2)^2 \sin^2 \varkappa a}$$

$$\left(k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu E}, \quad \varkappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu(E - V_0)}\right).$$

2.5. Für den Fall $E < V_0$ kann man die Wellenfunktion aus den Ausdrücken für die Wellenfunktionen in der Aufgabe 1.12. durch Vorzeichenänderung von E und V_0 gewinnen.

Die zur Energie E gehörige Wellenfunktion besitzt die allgemeine Form

$$\psi = c_1 \left(\cosh\frac{x}{a}\right)^{-2\lambda} F\left(-\lambda + \frac{ika}{2}, \quad -\lambda - \frac{ika}{2}, \quad \frac{1}{2}; \quad -\sinh^2\frac{x}{a}\right)$$
$$+ c_2 \left(\cosh\frac{x}{a}\right)^{-2\lambda} \sinh\frac{x}{a}$$
$$\times F\left(-\lambda + \frac{ika}{2} + \frac{1}{2}, \quad -\lambda - \frac{ika}{2} + \frac{1}{2}, \quad \frac{3}{2}; \quad -\sinh^2\frac{x}{a}\right) \qquad (1)$$

mit $\quad \lambda = \frac{1}{4}\left(\sqrt{1 - \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}} - 1\right), \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu E}.$

Die Koeffizienten c_1 und c_2 erhält man aus der Bedingung, daß die Wellenfunktion für $x \to +\infty$ die asymptotische Form $\psi \approx e^{ikx}$ haben muß.

Die Ermittlung der asymptotischen Form von (1) geschieht mit Hilfe der Beziehung

$$F(\alpha, \beta, \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma)\,\Gamma(\beta - \alpha)}{\Gamma(\beta)\,\Gamma(\gamma - \alpha)}(-z)^{-\alpha} F\left(\alpha, \alpha + 1 - \gamma, \alpha + 1 - \beta; \frac{1}{z}\right)$$
$$+ \frac{\Gamma(\gamma)\,\Gamma(\alpha - \beta)}{\Gamma(\alpha)\,\Gamma(\gamma - \beta)}(-z)^{-\beta} F\left(\beta, \beta + 1 - \gamma, \beta + 1 - \alpha; \frac{1}{z}\right).$$

Es folgt

$$\psi_{x \to -\infty} \approx (-1)^{2\lambda}\left\{(c_1 A_1 - c_2 A_2)\left(-\frac{1}{2}\right)^{-ika} e^{ikx} + (c_1 B_1 - c_2 B_2)\left(-\frac{1}{2}\right)^{ika} e^{-ikx}\right\}, \tag{2}$$

$$\psi_{x \to +\infty} \approx \left\{(c_1 A_1 + c_2 A_2)\left(\frac{1}{2}\right)^{-ika} e^{-ikx} + (c_1 B_1 + c_2 B_2)\left(\frac{1}{2}\right)^{ika} e^{ikx}\right\} \tag{3}$$

mit

$$A_1 = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma(-ika)}{\Gamma\left(-\lambda - \frac{ika}{2}\right)\Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2} - \frac{ika}{2}\right)},$$

$$A_2 = \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma(-ika)}{\Gamma\left(-\lambda + \frac{1}{2} - \frac{ika}{2}\right)\Gamma\left(\lambda + 1 - \frac{ika}{2}\right)},$$

$$B_1 = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma(ika)}{\Gamma\left(-\lambda + \frac{ika}{2}\right)\Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2} + \frac{ika}{2}\right)},$$

$$B_2 = \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma(ika)}{\Gamma\left(-\lambda + \frac{1}{2} + ika\right)\Gamma\left(\lambda + 1 + \frac{ika}{2}\right)}.$$

Das unterschiedliche Vorzeichen vor dem Koeffizienten c_2 in den Ausdrücken (2) und (3) erklärt sich dadurch, daß $\sinh x/a$ eine ungerade Funktion ist und der zweite Term in (1) beim Übergang von positiven zu negativen x sein Vorzeichen ändert.

Die Forderung, daß für $+\infty$ nur eine hindurchgelassene Welle vorhanden sein soll, führt zu einer Beziehung zwischen den Koeffizienten c_1 und c_2:

$$c_1 A_1 + c_2 A_2 = 0.$$

Für die Durchlässigkeit erhält man

$$D = \frac{|c_1 B_1 + c_2 B_2|^2}{|c_1 A_1 - c_2 A_2|^2}.$$

Setzt man in diese Formel die Ausdrücke für die Koeffizienten A_1, A_2, B_1 und B_2 ein, so folgt nach einfachen Umformungen

$$D = \frac{\sinh^2 \pi ka}{\sinh^2 \pi ka + \cos^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{1 - 8\mu V_0 a^2 \hbar^{-2}}\right)} \quad \text{für} \quad \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} < 1$$

und

$$D = \frac{\sinh^2 \pi ka}{\sinh^2 \pi ka + \cosh^2\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{8\mu V_0 a^2 \hbar^{-2} - 1}\right)} \quad \text{für} \quad \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} > 1.$$

2.6. Die potentielle Energie des Elektrons ist von der in Abb. 10 gezeigten Form. Die Durchlässigkeit beträgt

$$D \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_0^{x_0} \sqrt{2\mu(|E| - Fx)}\, dx\right],$$

wobei die Punkte $x = 0$ und $x = x_0 = |E|/F$ das Gebiet begrenzen, in welchem sich nach der klassischen Mechanik das Teilchen nicht aufhalten kann. Rechnet man das im Exponenten stehende Integral aus, so findet man

$$D \approx \exp\left(-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar F}|E|^{3/2}\right). \tag{1}$$

Zur Frage der Anwendbarkeit dieses Ergebnisses bemerken wir, daß die quasiklassische Betrachtung innerhalb des Gebietes $x - x_0 \lesssim \left(\frac{\hbar^2}{2\mu F}\right)^{1/3}$ in der Nähe des klassischen Umkehrpunktes x_0 nicht zulässig ist. Die Formel (1)

ist anwendbar, wenn dieses Gebiet kleiner als die Schwellenbreite $x_0 = |E|/F$ ist:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu F}\right)^{1/3} \ll \frac{|E|}{F} \quad \text{oder} \quad \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar F}|E|^{3/2} \gg 1.$$

Die letzte Bedingung ist also der Forderung äquivalent, daß die Durchlässigkeit klein ist ($D \ll 1$).

Die Durchlässigkeit D nimmt mit wachsendem $|E|$ schnell ab und mit wachsendem F zu (vgl. Tab. 1).

Tabelle 1

Durchlässigkeit

F[V/cm]	10^6	$5 \cdot 10^6$	10^7	$2 \cdot 10^7$	$3 \cdot 10^7$	$5 \cdot 10^7$	10^8
Ohne elektrische Bildkraft							
$E = -2$ V	10^{-84}	$1{,}3 \cdot 10^{-17}$	$3{,}5 \cdot 10^{-9}$	$6 \cdot 10^{-5}$	$1{,}5 \cdot 10^{-3}$	0,02	0,14
$E = -3$ V	10^{-154}	$1{,}3 \cdot 10^{-31}$	$3{,}5 \cdot 10^{-16}$	$19 \cdot 10^{-8}$	$7 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-4}$	0,029
$E = -5$ V	10^{-332}	$4 \cdot 10^{-67}$	$6 \cdot 10^{-34}$	$2{,}5 \cdot 10^{-17}$	10^{-11}	$2{,}5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-4}$
Mit elektrischer Bildkraft							
$E = -2$ V	10^{-80}	$8 \cdot 10^{-15}$	$1{,}3 \cdot 10^{-6}$	0,013	1[1])	1	1
$E = -3$ V	10^{-150}	$5 \cdot 10^{-28}$	$7 \cdot 10^{-14}$	$2{,}3 \cdot 10^{-6}$	$7 \cdot 10^{-4}$	0,07	1
$E = -5$ V	10^{-328}	$8 \cdot 10^{-65}$	10^{-31}	$2 \cdot 10^{-15}$	$6 \cdot 10^{-10}$	10^{-5}	0,01

2.7. Die gesamte potentielle Energie beträgt

$$V = -Fx - \frac{e^2}{4x}.$$

Wir merken an, daß dieser Ausdruck für kleine x (von der Größenordnung des Abstandes zwischen zwei Atomen) seine Gültigkeit verliert. Für die Berechnung der Durchlässigkeit ist der genaue Verlauf des Potentials in diesem Gebiet jedoch unwesentlich.

Die Durchlässigkeit beträgt

$$D \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2\mu\left(|E| - Fx - \frac{e^2}{4x}\right)}\,dx\right\} = \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} p\,dx\right\}.$$

[1]) Ist die Durchlässigkeit gleich 1, so kann das Teilchen nach der klassischen Mechanik aus dem Metall austreten.

Dabei findet man die Umkehrpunkte x_1 und x_2 aus der Bedingung, daß dort der klassische Impuls des Teilchens verschwindet:

$$p = \sqrt{2\mu\left(|E| - Fx - \frac{e^2}{4x}\right)} = 0,$$

$$x_{1,2} = \frac{|E| \pm \sqrt{E^2 - e^2 F}}{2F}.$$

Das Integral

$$\int_{x_1}^{x_2} p\,dx = \sqrt{2\mu}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{|E| - Fx - \frac{e^2}{4x}}\,dx$$

ist ein vollständiges elliptisches Integral. Durch Einführung der unabhängigen Variablen $\xi = F|E|^{-1}x$ reduziert sich das Integral auf eine Funktion eines Parameters:

$$\int_{x_1}^{x_2} p\,dx = \frac{2}{3}\sqrt{2\mu}\,\frac{|E|^{3/2}}{F}\,\varphi(y), \quad y = \frac{\sqrt{e^2 F}}{2|E|}.$$

Dabei gilt

$$\varphi(y) = \frac{3}{2}\int_{\xi_1}^{\xi_2}\sqrt{1 - y^2\xi^{-1} - \xi}\,d\xi.$$

Die Integrationsgrenzen ξ_1 und ξ_2 folgen aus der Bedingung, daß der unter dem Wurzelzeichen stehende Ausdruck verschwindet. Man erhält

$$D = \exp\left[-k_0\varphi(y)\right]$$

mit

$$k_0 = \frac{4}{3}\sqrt{2\mu}\,\frac{|E|^{3/2}}{F}.$$

Die Durchlässigkeit ergibt sich ohne Berücksichtigung der elektrischen Bildkraft ($y = 0$) zu $D = \mathrm{e}^{-k_0}$ (vgl. Aufgabe 2.6.). Die Werte von $\varphi(y)$ sind in der Tab. 2 angegeben. Der Einfluß der elektrischen Bildkraft auf die Durchlässigkeit einer Potentialschwelle ist aus den Daten der Tab. 1 ersichtlich.

Tabelle 2

y	0	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
$\varphi(y)$	1,000	0,951	0,904	0,849	0,781	0,696	0,603	0,494	0,345	0,000

2.8. Die Wellenfunktion hat die Form

$$\psi_{\mathrm{I}} = A \sin kx, \qquad 0 < x < a,$$

$$\psi_{\mathrm{II}} = B_1 \, \mathrm{e}^{\varkappa x} + B_2 \, \mathrm{e}^{-\varkappa x}, \qquad a < x < a + b,$$

$$\psi_{\mathrm{III}} = C \sin k\,(2a + b - x), \quad a + b < x < 2a + b$$

mit

$$k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \quad \varkappa = \frac{\sqrt{2\mu(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

Die Stetigkeitsforderung an die Wellenfunktion und ihre Ableitung liefert die Beziehungen

$$A \sin ka = B_1 \, \mathrm{e}^{\varkappa a} + B_2 \, \mathrm{e}^{-\varkappa a},$$

$$Ak \cos ka = \varkappa(B_1 \, \mathrm{e}^{\varkappa a} - B_2 \, \mathrm{e}^{-\varkappa a}),$$

$$B_1 \, \mathrm{e}^{\varkappa(a+b)} + B_2 \, \mathrm{e}^{-\varkappa(a+b)} = C \sin ka,$$

$$\varkappa(B_1 \, \mathrm{e}^{\varkappa(a+b)} - B_2 \, \mathrm{e}^{-\varkappa(a+b)}) = -Ck \cos ka.$$

Eliminiert man aus diesen Gleichungen B_1 und B_2, so findet man

$$\left(\frac{\varkappa}{k} \tan ka + 1\right) A \, \mathrm{e}^{\varkappa b} = \left(\frac{\varkappa}{k} \tan ka - 1\right) C,$$

$$\left(\frac{\varkappa}{k} \tan ka - 1\right) A \, \mathrm{e}^{-\varkappa b} = \left(\frac{\varkappa}{k} \tan ka + 1\right) C.$$

Aus der Bedingung des Verschwindens der Determinante

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{\varkappa}{k} \tan ka + 1\right) \mathrm{e}^{\varkappa b} & -\left(\frac{\varkappa}{k} \tan ka - 1\right) \\ \left(\frac{\varkappa}{k} \tan ka - 1\right) \mathrm{e}^{-\varkappa b} & -\left(\frac{\varkappa}{k} \tan ka + 1\right) \end{vmatrix} = 0$$

folgt

$$\left(\frac{\varkappa}{k} \tan ka + 1\right) \mathrm{e}^{\varkappa b} = \pm \left(\frac{\varkappa}{k} \tan ka - 1\right).$$

Diese Gleichung bestimmt die Energieniveaus.

Benutzt man die Ungleichung

$$\varkappa b \gg 1,$$

so läßt sich die letzte Gleichung näherungsweise darstellen in der Form

$$\tan ka = -\frac{k}{\varkappa} \mp 2\frac{k}{\varkappa} e^{-\varkappa b}.$$

Die rechte Seite dieser Gleichung ist klein. In nullter Näherung erhält man ($k \ll \varkappa$):

$$k_0 = \frac{n\pi}{a}, \quad E_n^{(0)} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu\, a^2}.$$

Das sind die Ausdrücke für die Energiewerte eines Teilchens, das sich in einem Potentialkasten befindet (vgl. Aufgabe 1.1.).

In der nächsten Näherung gilt

$$k = \frac{n\pi}{a} - \frac{k_0}{a\varkappa_0} \mp 2\frac{k_0}{a\varkappa_0} e^{-\varkappa_0 b}, \quad n = 1, 2, 3, \ldots,$$

$$E_n = E_n^{(0)} - \frac{2E_n^{(0)}}{a\varkappa_0} \mp 4\frac{E_n^{(0)}}{a\varkappa_0} e^{-\varkappa_0 b}, \quad \varkappa_0 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0 - E_n^{(0)})}.$$

Die ersten beiden Terme

$$E_n^{(1)} = E_n^{(0)} - \frac{2E_n^{(0)}}{a\varkappa_0}$$

hängen nicht von b ab und sind die genäherten Werte der Energieniveaus für ein Teilchen, das sich in dem in Abb. 20 dargestellten Potentialtopf befindet ($b \to \infty$).

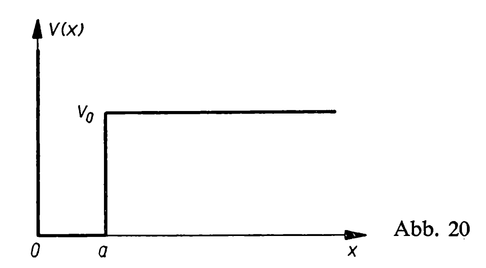


Abb. 20

In dieser Näherung sind die Niveaus entsprechend der Möglichkeit, das Teilchen im Gebiet I wie im Gebiet III vorzufinden, zweifach entartet. Die Berücksichtigung der Endlichkeit von b, d. h. der Möglichkeit des Durchgangs des Teilchens durch die Potentialschwelle, führt zur Aufspaltung der Niveaus. Diese Aufspaltung ist exponentiell klein. Wir ermitteln in der

betrachteten Näherung die Koeffizienten A, B_1, B_2 und C. Dem niedrigeren Niveau

$$E_n^- = E_n^{(1)} - 4\frac{E_n^{(0)}}{a\varkappa_0} e^{-\varkappa_0 b}$$

entsprechen die Koeffizienten

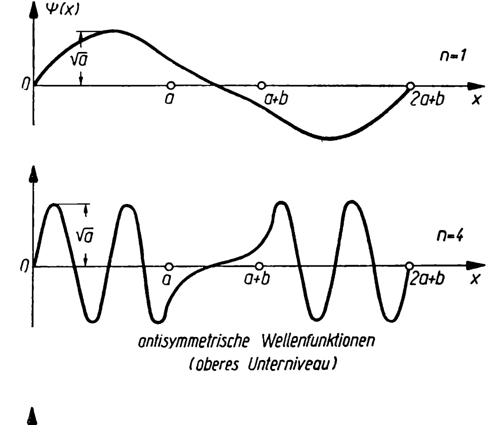
$$B_1 = (-1)^{n-1}\frac{k_0}{\varkappa_0} e^{-\varkappa_0(b+a)} A,$$

$$C = A,$$

$$B_2 = (-1)^{n-1}\frac{k_0}{\varkappa_0} e^{\varkappa_0 a} A,$$

dem höheren Niveau

$$E_n^+ = E_n^{(1)} + 4\frac{E_n^{(0)}}{a\varkappa_0} e^{-\varkappa_0 b}$$



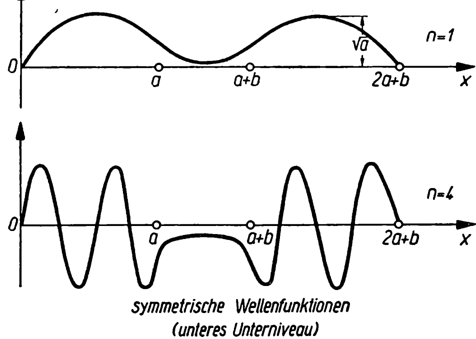


Abb. 21

die Koeffizienten

$$B_1 = -(-1)^{n-1} \frac{k_0}{\varkappa_0} e^{-\varkappa_0(a+b)} A,$$

$$C = -A,$$

$$B_2 = (-1)^{n-1} \frac{k_0}{\varkappa_0} e^{\varkappa_0 a} A.$$

A läßt sich aus der Normierungsbedingung bestimmen und ist gleich $1/\sqrt{a}$ (bei der Berechnung des Normierungsintegrals kann man die Beiträge des Gebietes II vernachlässigen).

Dem niedrigeren Niveau entspricht also die Wellenfunktion

$$\psi_{\text{I}} = a^{-1/2} \sin kx,$$

$$\psi_{\text{II}} = (-1)^{n-1} a^{-1/2} \frac{k_0}{\varkappa_0} \{e^{-\varkappa_0(x-a)} + e^{-\varkappa_0(a+b-x)}\},$$

$$\psi_{\text{III}} = a^{-1/2} \sin k(2a + b - x),$$

während man für das höhere Niveau

$$\psi_{\text{I}} = a^{-1/2} \sin kx,$$

$$\psi_{\text{II}} = (-1)^{n-1} a^{-1/2} \frac{k_0}{\varkappa_0} \{e^{-\varkappa_0(x-a)} - e^{-\varkappa_0(a+b-x)}\},$$

$$\psi_{\text{III}} = -a^{-1/2} \sin k(2a + b - x)$$

findet. In der Abb. 21 sind die Wellenfunktionen für $n = 1$ und $n = 4$ graphisch dargestellt.

2.9. Für das Gebiet $x < -b$ erhält man die Wellenfunktion

$$\psi = \frac{c}{\sqrt{|p|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_x^{-b} |p|\, dx\right]$$

(die Lösung muß im Unendlichen verschwinden).

Im Gebiet $-b < x < -a$ gilt

$$\psi = \frac{c}{\sqrt{p}} \exp\left(-i\frac{\pi}{4} + \frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{x} p\, dx\right) + \frac{c}{\sqrt{p}} \exp\left(i\frac{\pi}{4} - \frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{x} p\, dx\right)$$

$$= \frac{c}{\sqrt{p}} \exp\left(-i\frac{\pi}{4} + \frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{-a} p\, dx - \frac{i}{\hbar}\int_x^{-a} p\, dx\right)$$

$$+ \frac{c}{\sqrt{p}} \exp\left(i\frac{\pi}{4} - \frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{-a} p\, dx + \frac{i}{\hbar}\int_x^{-a} p\, dx\right),$$

im Gebiet $-a < x < +a$

$$\psi = c\exp\left(-i\frac{\pi}{4} + \frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{-a} p\,dx\right)\left\{\frac{1}{2\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{i\pi}{4} - \frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{x}|p|\,dx\right)\right.$$

$$\left. + \frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(i\frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{x}|p|\,dx\right)\right\}$$

$$+ c\exp\left(i\frac{\pi}{4} - \frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{-a} p\,dx\right)\left\{\frac{1}{2\sqrt{|p|}}\exp\left(i\frac{\pi}{4} - \frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{x}|p|\,dx\right)\right.$$

$$\left. + \frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-i\frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{x}|p|\,dx\right)\right\}$$

$$= \frac{c}{\sqrt{|p|}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{-a} p\,dx\right)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\,dx + \frac{1}{\hbar}\int_{x}^{+a}|p|\,dx\right)$$

$$+ \frac{2c}{\sqrt{|p|}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{-a} p\,dx\right)\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\,dx - \frac{1}{\hbar}\int_{x}^{+a}|p|\,dx\right).$$

Für $+a < x < +b$ erhält man analog

$$\psi = c\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{-a} p\,dx\right)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\,dx\right)\left\{\frac{1}{2\sqrt{p}}\right.$$

$$\left.\times\exp\left(-i\frac{\pi}{4} - \frac{i}{\hbar}\int_{+a}^{x} p\,dx\right) + \frac{1}{2\sqrt{p}}\exp\left(i\frac{\pi}{4} + \frac{i}{\hbar}\int_{+a}^{x} p\,dx\right)\right\}$$

$$+ 2c\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{-a} p\,dx\right)\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\,dx\right)$$

$$\times\left\{\frac{1}{\sqrt{p}}\exp\left(-i\frac{\pi}{4} + \frac{i}{\hbar}\int_{+a}^{x} p\,dx\right) + \frac{1}{\sqrt{p}}\exp\left(i\frac{\pi}{4} - \frac{i}{\hbar}\int_{a}^{x} p\,dx\right)\right\}$$

$$= \frac{c}{\sqrt{p}}\left\{\frac{1}{2}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{-a} p\,dx\right)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\,dx - i\frac{\pi}{4}\right)\right.$$

$$\left. + 2\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\,dx\right)\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\,dx + i\frac{\pi}{4}\right)\right\}$$

$$\times\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{+a}^{+b} p\,dx + \frac{i}{\hbar}\int_{x}^{+b} p\,dx\right) + \frac{c}{\sqrt{p}}\left\{\frac{1}{2}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{-a} p\,dx\right)\right.$$

$$\times\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\,dx + i\frac{\pi}{4}\right) + 2\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\,dx\right)$$

$$\left.\times\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\,dx - i\frac{\pi}{4}\right)\right\}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{+a}^{+b} p\,dx - \frac{i}{\hbar}\int_{x}^{+b} p\,dx\right).$$

Schließlich ergibt sich, wenn man diese Lösung in das Gebiet $x > +b$ fortsetzt:

$$\psi = \frac{c}{\sqrt{|p|}} \left\{ \frac{1}{2} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx\right) \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx\right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} |p|\,dx\right) \right.$$

$$\left. + 2\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx\right) \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx\right) \exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} |p|\,dx\right) \right\}$$

$$\times \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p|\,dx\right)$$

$$+ \frac{c}{\sqrt{|p|}} \left\{ -\sin^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx\right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} |p|\,dx\right) \right.$$

$$\left. + 4\cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx\right) \exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} |p|\,dx\right) \right\} \exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p|\,dx\right).$$

Damit die Lösung für $x \to +\infty$ gegen Null strebt, muß der Koeffizient von

$$\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p|\,dx\right)$$

verschwinden:

$$-\sin^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx\right) \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} |p|\,dx\right)$$

$$+ 4\cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx\right) \exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} |p|\,dx\right) = 0.$$

Daraus folgt

$$\cot\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx\right) = \pm\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} |p|\,dx\right).$$

Setzt man die Durchlässigkeit der Schwelle als klein voraus, so erhält man als Bedingung für die Bestimmung der Energieniveaus

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dx = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right) \pm \frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} |p|\,dx\right).$$

Wir bezeichnen mit $E_n^{(0)}$ die Energieniveaus einer einzigen Potentialmulde:

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2\mu(E_n^{(0)} - V)}\,dx = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Die Energieniveaus in den beiden Potentialmulden, $E_n = E_n^{(0)} + \Delta E_n$, finden wir aus der gewonnenen Quantenbedingung, indem wir $\sqrt{2\mu(E_n - V)}$ in eine Reihe nach ΔE_n entwickeln und uns auf den in ΔE_n linearen Term

beschränken:

$$\Delta E_n \frac{\mu}{\hbar} \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_n^{(0)} - V)}} = \pm \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p|\, dx\right)$$

oder

$$\Delta E_n = \pm \frac{\hbar\omega}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p|\, dx\right),$$

wobei ω die Kreisfrequenz der klassischen Bewegung in einer einzigen Potentialmulde ist:

$$\frac{2\pi}{\omega} = 2\mu \int_a^b \frac{dx}{p}.$$

Die Aufspaltung des Energieniveaus $E_n^{(0)}$ ist gleich $2|\Delta E_n|$.

2.10. $\tau = \dfrac{\pi^2}{\omega} \exp\left(\dfrac{1}{\hbar} \displaystyle\int_{-a}^{+a} |p|\, dx\right).$

2.11. Im Gebiet $b_n < x < a_{n+1}$ der n-ten Potentialschwelle läßt sich die Wellenfunktion folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned}
\psi &= \frac{C_n}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{x} |p|\, dx\right) + \frac{D_n}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{x} |p|\, dx\right) \\
&= \frac{C_n}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p|\, dx + \frac{1}{\hbar} \int_{x}^{a_{n+1}} |p|\, dx\right) \\
&\quad + \frac{D_n}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p|\, dx - \frac{1}{\hbar} \int_{x}^{a_{n+1}} |p|\, dx\right),
\end{aligned}$$

und wenn man diese Funktion in das Gebiet der $(n + 1)$-ten Potentialschwelle $b_{n+1} < x < a_{n+2}$ fortsetzt, erhält man

$$\begin{aligned}
\psi &= \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{b_{n+1}}^{x} |p|\, dx\right) \left\{ \frac{C_n}{2} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p|\, dx\right) \cdot \right. \\
&\quad \times \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}} p\, dx\right) + D_n \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p|\, dx\right) \\
&\quad \left. \times \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}} p\, dx\right) \right\} + \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{b_{n+1}}^{x} |p|\, dx\right) \\
&\quad \times \left\{ -C_n \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p|\, dx\right) \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}} p\, dx\right) \right. \\
&\quad \left. + 2D_n \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p|\, dx\right) \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}} p\, dx\right) \right\}.
\end{aligned}$$

Mit den Größen

$$\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_2}|p|\,dx = \frac{1}{\hbar}\int_{b_2}^{a_3}|p|\,dx = \cdots = \frac{1}{\hbar}\int_{b_{N-1}}^{a_N}|p|\,dx = \tau,$$

$$\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{b_1}p\,dx = \frac{1}{\hbar}\int_{a_2}^{b_2}p\,dx = \cdots = \frac{1}{\hbar}\int_{a_N}^{b_N}p\,dx = \sigma$$

läßt sich der Ausdruck für ψ im Gebiet der $(n + 1)$-ten Schwelle wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_{n+1}}^{x}|p|\,dx\right)\left\{\frac{C_n}{2}\,\mathrm{e}^{-\tau}\cos\sigma + D_n\,\mathrm{e}^{\tau}\sin\sigma\right\}\\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{b_{n+1}}^{x}|p|\,dx\right)\left\{-C_n\,\mathrm{e}^{-\tau}\sin\sigma + 2D_n\,\mathrm{e}^{\tau}\cos\sigma\right\}\\ &= \frac{C_{n+1}}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_{n+1}}^{x}|p|\,dx\right) + \frac{D_{n+1}}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{b_{n+1}}^{x}|p|\,dx\right),\end{aligned}$$

wobei

$$C_{n+1} = \frac{C_n}{2}\,\mathrm{e}^{-\tau}\cos\sigma + D_n\,\mathrm{e}^{\tau}\sin\sigma,$$

$$D_{n+1} = -C_n\,\mathrm{e}^{-\tau}\sin\sigma + 2D_n\,\mathrm{e}^{\tau}\cos\sigma$$

ist. Der Zusammenhang der Koeffizienten C_{n+1}, D_{n+1} und C_n, D_n kann mit Hilfe einer Matrix dargestellt werden:

$$\begin{pmatrix}C_{n+1}\\ D_{n+1}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\tau}\cos\sigma & \mathrm{e}^{\tau}\sin\sigma\\ -\mathrm{e}^{-\tau}\sin\sigma & 2\mathrm{e}^{\tau}\cos\sigma\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_n\\ D_n\end{pmatrix} = A\begin{pmatrix}C_n\\ D_n\end{pmatrix}. \tag{1}$$

Wendet man die Beziehung (1) N-mal an, so erhält man den Zusammenhang zwischen C_N, D_N und C_0, D_0:

$$\begin{pmatrix}C_N\\ D_N\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\tau}\cos\sigma & \mathrm{e}^{\tau}\sin\sigma\\ -\mathrm{e}^{-\tau}\sin\sigma & 2\mathrm{e}^{\tau}\cos\sigma\end{pmatrix}^N\begin{pmatrix}C_0\\ D_0\end{pmatrix} = A^N\begin{pmatrix}C_0\\ D_0\end{pmatrix}.$$

Die Wellenfunktion des stationären Zustandes muß sowohl für $x < a_1$ als auch für $x > b_N$ abnehmen. Daher muß man fordern, daß $C_0 = D_N = 0$ gilt. Das ist aber der Fall, wenn das Element $(A^N)_{22}$ verschwindet. Die Bedingung $(A^N)_{22} = 0$ bestimmt das Energiespektrum des Problems. Zur Berechnung des fraglichen Matrixelements betrachten wir die Matrix

$$S = \mathrm{e}^{At} = 1 + tA + \frac{t^2}{2!}A^2 + \cdots + \frac{t^N}{N!}A^N + \cdots$$

Wie man sofort erkennt, genügt die Matrix S der Gleichung

$$\frac{dS}{dt} = AS \tag{2}$$

mit der Anfangsbedingung

$$S(0) = 1.$$

Die Gl. (2) lautet ausführlicher

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

oder

$$\frac{dS_{11}}{dt} = \alpha S_{11} + \beta S_{21}, \quad \frac{dS_{12}}{dt} = \alpha S_{12} + \beta S_{22},$$

$$\frac{dS_{21}}{dt} = \gamma S_{11} + \delta S_{21}, \quad \frac{dS_{22}}{dt} = \gamma S_{12} + \delta S_{22}.$$

Da die Bedingung, welche das Energiespektrum bestimmt, in der Form

$$(A^N)_{22} = \left(\frac{d^N S_{22}}{dt^N}\right)_{t=0} = 0$$

geschrieben werden kann, genügt es, das zweite Gleichungspaar zu betrachten.

Setzt man

$$S_{12} = f\,e^{\lambda t}, \quad S_{22} = g\,e^{\lambda t},$$

so folgt

$$f\lambda = \alpha f + \beta g, \quad g\lambda = \gamma f + \delta g.$$

Die Größe λ ergibt sich aus der Gleichung

$$\begin{vmatrix} \alpha - \lambda & \beta \\ \gamma & \delta - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad \lambda^2 - \lambda\left(2e^{\tau} + \frac{1}{2}e^{-\tau}\right)\cos\sigma + 1 = 0,$$

die zwei Wurzeln λ_1 und λ_2 besitzt. Wegen $\lambda_1\lambda_2 = 1$ kann man $\lambda_{1,2} = e^{\pm iu}$ setzen mit

$$\cos u = \left(e^{\tau} + \frac{1}{4}e^{-\tau}\right)\cos\sigma.$$

Für $\lambda_1 \neq \lambda_2$ erhält man die den Anfangsbedingungen $S_{12}(0) = 0$ und $S_{22}(0) = 1$

genügende Lösung in der Form

$$S_{12} = \beta(e^{\lambda_1 t} - e^{\lambda_2 t}),$$

$$S_{22} = \frac{(\lambda_1 - \alpha)\, e^{\lambda_1 t} - (\lambda_2 - \alpha)\, e^{\lambda_2 t}}{\lambda_1 - \lambda_2}.$$

Die Bedingung, die das Energiespektrum des Problems bestimmt, ergibt sich dann in der Form

$$(A^N)_{22} = \left(\frac{d^N S_{22}}{dt^N}\right)_{t=0} = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2}\{(\lambda_1 - \alpha)\,\lambda_1^N - (\lambda_2 - \alpha)\,\lambda_2^N\} = 0.$$

Wir setzen in diesen Ausdruck

$$\lambda_{1,2} = e^{\pm iu}$$

ein und vernachlässigen $e^{-\tau}$ in der Formel für $\cos u$ (das entspricht der Annahme, daß die Durchlässigkeit der Schwelle klein ist):

$$\cos u \approx e^{\tau} \cos \sigma.$$

Unter dieser Voraussetzung nimmt die Eigenwertbedingung eine einfache Form an:

$$\frac{\sin (N+1)\, u}{\sin u} = 0.$$

Diese Gleichung besitzt die Wurzeln

$$u = \frac{n\pi}{N+1}$$

mit Ausnahme von $u = 0, \pi, 2\pi$.

Für $\cos u$ existieren N verschiedene Werte:

$$\cos u = \cos \frac{n\pi}{N+1} \approx e^{\tau} \cos \sigma \quad (n = 1, 2, \ldots, N)$$

oder ausgeschrieben

$$\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{b_1} p\, dx\right) = \left[\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_2} |p|\, dx\right)\right] \cos \frac{\pi n}{N+1} \quad (n = 1, 2, \ldots, N).$$

Da

$$\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_2} |p|\, dx\right)$$

klein ist, kann man die letzte Beziehung schreiben

$$\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{b_1} p\,dx = \pi\left(m+\frac{1}{2}\right) + \left[\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_2}|p|\,dx\right)\right]\cos\frac{\pi n}{N+1} \tag{3}$$

$$(m = 0, 1, 2, \ldots;\ n = 1, 2, \ldots, N).$$

Damit haben wir die Bedingung für die Bestimmung der Energieniveaus im Potentialfeld $V(x)$ gewonnen. Sie weist weitgehende Ähnlichkeit mit der Quantenbedingung für das Feld einer einzigen Potentialmulde auf. Die Gl. (3) sagt aus, daß das Energiespektrum im Feld $V(x)$ in groben Zügen das Energiespektrum einer einzigen Mulde darstellt, in dem alle Niveaus in N Unterniveaus aufgespalten sind. Wir bestimmen den Abstand ΔE_m zwischen den zum gleichen Niveau gehörigen Unterniveaus. Es gilt

$$\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{b_1}\sqrt{2\mu(E_m^{(0)}-V)}\,dx + \frac{2\mu}{2\hbar}\int_{a_1}^{b_1}\frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_m^{(0)}-V)}}\,\Delta E_m$$

$$= \pi\left(m+\frac{1}{2}\right) + \left[\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_2}|p|\,dx\right)\right]\cos\frac{\pi n}{N+1} \quad (n = 1, 2, \ldots, N),$$

woraus mit

$$\frac{\pi}{\omega} = \mu\int_{a_1}^{b_1}\frac{dx}{p} = \mu\int_{a_1}^{b_1}\frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_m^{(0)}-V)}}$$

folgt

$$\Delta E_m = \frac{\hbar\omega}{\pi}\left[\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_2}|p|\,dx\right)\right]\cos\frac{n\pi}{N+1} \quad (n = 1, 2, \ldots, N).$$

Der Abstand zwischen oberem und unterem Unterniveau ist gleich

$$\frac{2\hbar\,\omega}{\pi}\left[\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_2}|p|\,dx\right)\right]\cos\frac{\pi}{N+1}.$$

2.12. Im Gebiet $x < -b$ gibt es im Sinne der Problemstellung nur eine nach $-\infty$ fortschreitende Welle:

$$\psi = \frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_x^{-b} p\,dx\right).$$

Setzt man diese Lösung in das Gebiet $x > b$ fort, so erhält man den folgenden

Ausdruck für die Wellenfunktion:

$$\psi = \frac{c}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_b^x p\,dx\right)\left\{\frac{1}{8}\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\,dx + i\frac{\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\,dx\right)\right.$$

$$\left. + 2\exp\left(\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\,dx - i\frac{\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\,dx\right)\right\}$$

$$+ \frac{c}{\sqrt{p}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_b^x p\,dx\right)\left\{\frac{1}{8}\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\,dx\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\,dx\right)\right.$$

$$\left. - i\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\,dx\right) + 2\exp\left(\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\,dx\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\,dx\right)\right\}.$$

Die quasistationären Niveaus ergeben sich aus der Bedingung, daß es keine nach $+\infty$ auslaufende Welle gibt.

Setzt man im letzten Ausdruck den zweiten Term gleich Null, so erhält man

$$\cot\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\,dx\right) = i\left\{\frac{1}{8}\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\,dx\right) + 2\exp\left(\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\,dx\right)\right\}^{-1}.$$

Setzt man die Größe

$$\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\,dx\right)$$

als klein voraus, so findet man

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\,dx = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{i}{2}\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\,dx\right),$$

woraus die Bedingung für die Bestimmung der quasistationären Niveaus $E_n^{(0)}$ und ihrer Breiten Γ folgt:

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} \sqrt{2\mu(E_n^{(0)} - V)}\,dx = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots),$$

$$\frac{\hbar\omega}{2\pi}\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\,dx\right) = \Gamma$$

mit

$$\omega = \pi\left(\mu\int_{-a}^{+a} \frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_n^{(0)} - V)}}\right)^{-1}.$$

Die Durchlässigkeit ergibt sich zu

$$D(E) = \left\{4 \exp\left(\frac{4}{\hbar}\int_a^b |p|\, dx\right)\cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\, dx\right) + \sin^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\, dx\right)\right\}^{-1}.$$

Für die Werte E, die mit einem der quasistationären Niveaus übereinstimmen, gilt $D(E_n^{(0)}) = 1$. Für $|\Delta E| < |E_n^{(0)}|$ folgt

$$D(E_n^{(0)} + \Delta E) = \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + (\Delta E)^2}.$$

Abb. 22 zeigt den Verlauf von $D(E)$ in der Umgebung eines quasistationären Niveaus.

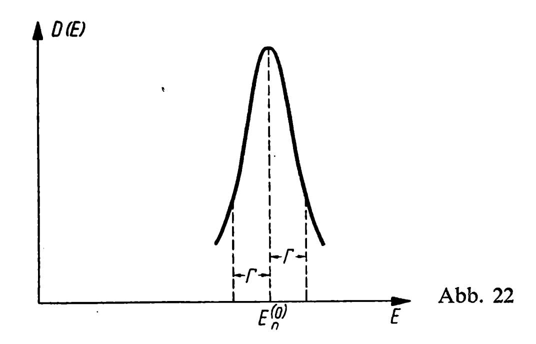


Abb. 22

2.13. Es gilt für $x < 0$

$$\psi = e^{ikx} + A\, e^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}$$

und für $x > 0$

$$\psi = B\, e^{ikx}.$$

Integrieren wir die SCHRÖDINGER-Gleichung in der Umgebung des Punktes $x = 0$, so finden wir, daß ψ' einen endlichen Sprung erleidet. Folglich ist ψ stetig. Die Koeffizienten A und B ergeben sich, indem man die Lösungen stetig aneinander anschließt:

$$A = \frac{-iS}{1 + iS}, \quad B = \frac{1}{1 + iS}, \quad S = \frac{\mu q}{k\hbar^2}.$$

Die Durchlässigkeit ist also

$$D = |B|^2 = \frac{1}{1 + \frac{\mu^2 q^2}{k^2 \hbar^4}}.$$

Diese Formel gilt sowohl für $q > 0$ als auch für $q < 0$. Im letzten Fall gibt es ein diskretes Niveau:

$$E_0 = -\frac{\mu q^2}{2\hbar^2}.$$

Daher gilt in diesem Fall

$$D = \frac{E}{E + |E_0|}.$$

Diese Energieabhängigkeit von D ist charakteristisch, wenn $\lambda \gg a$ gilt, wobei a die charakteristische Dimension der potentiellen Energie ist.

2.14. Da $V(x)$ eine gerade Funktion ist, wird die Wellenfunktion des stationären Zustandes entweder gerade oder ungerade sein. Daher genügt es, das Gebiet $x > 0$ zu betrachten.

In diesem Gebiet lautet die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\psi'' + k^2\psi = \varkappa\delta(x - a)\,\psi, \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad \varkappa = \frac{2\mu q}{\hbar^2}. \tag{1}$$

Integriert man diese Gleichung in der Umgebung des Punktes $x = a$, so erhält man

$$\psi'(a + 0) - \psi'(a - 0) = \varkappa\psi(a). \tag{2}$$

Die der Gl. (1) genügende ungerade Funktion besitzt die Form

$$\psi = \sin kx \qquad \text{für} \quad x < a,$$

$$\psi = A \sin(kx + \delta) \quad \text{für} \quad x > a.$$

Aus der Stetigkeitsbedingung für die Wellenfunktion und aus (2) folgen die beiden Gleichungen

$$\left.\begin{aligned} &\sin ka = A \sin(ka + \delta), \\ &Ak \cos(ka + \delta) - k \cos ka = \varkappa \sin ka. \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

Aus diesen Gleichungen ergibt sich, daß das Energiespektrum, wie erwartet, kontinuierlich ist. Bei vorgegebenem E kann man A und δ bestimmen.

Wir bestimmen nun diejenigen Werte von E, welche den Koeffizienten A zum Minimum machen (solche Werte von E werden als quasistationäre Niveaus bezeichnet).

Aus (3) folgt

$$A^2 = 1 + \frac{\varkappa^2}{k^2}\sin^2 ka + \frac{2\varkappa}{k}\sin ka \cos ka.$$

In unserem Fall gilt $\varkappa/k \gg 1$, und A wird eine kleine Größe sein, wenn $\sin ka$ näherungsweise gleich Null ist.

Wir setzen

$$\sin ka = \sin(n\pi + \varepsilon),$$

wobei ε eine kleine Größe ist. Vernachlässigen wir die Terme höheren als zweiten Grades in ε, so finden wir

$$A^2 = 1 + \frac{\varkappa^2}{k^2}\varepsilon^2 + \frac{2\varkappa}{k}\varepsilon = \left(1 + \frac{\varkappa}{k}\varepsilon\right)^2.$$

Wir wählen ε so, daß $A \approx 0$ wird. Dazu setzen wir

$$\varepsilon = -\frac{k}{\varkappa} \quad \left(\frac{k}{\varkappa} \ll 1\right).$$

Für die Energien

$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu\left(a + \frac{1}{\varkappa}\right)^2} \quad (n = 1, 2, \ldots)$$

wird die Amplitude der Wellenfunktion im Gebiet $|x| > a$ nahezu gleich Null sein. Führen wir die Rechnung für die gerade Wellenfunktion

$$\psi = \cos kx \qquad \text{für} \quad x < a,$$

$$\psi = A\cos(kx + \delta) \quad \text{für} \quad x > a$$

durch, so erhalten wir

$$E = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \pi^2\hbar^2}{2\mu\left(a - \frac{1}{\varkappa}\right)^2} \quad (n = 0, 1, 2, \ldots).$$

Man sieht sofort, daß das Spektrum für $\varkappa \to \infty$ durch eine einzige Formel beschrieben wird:

$$E \to \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu(2a)^2} \quad (n = 1, 2, \ldots),$$

d. h., die quasistationären Niveaus gehen in die Niveaus eines Teilchens im Potentialkasten über (vgl. Aufgabe 1.1.).

2.15. Man erhält

$$D = \left\{1 + \frac{\varkappa^4}{4k^4}\sin^2 2ka + \frac{\varkappa^2}{k^2}\cos^2 2ka + \frac{\varkappa^3}{k^3}\sin 2ka\cos 2ka\right\}^{-1}$$

$$\varkappa = \frac{2\mu\, q}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2\mu\, E}{\hbar^2}.$$

Wir betrachten den Fall $\varkappa/k \gg 1$. Wir nehmen an, daß die Energie E des Teilchens gleich dem Wert eines quasistationären Niveaus ist. Es ist dann

$$\sin 2ka = 2\varepsilon \quad \left(\varepsilon = -\frac{k}{\varkappa}\right), \qquad \cos 2ka = 1.$$

Setzen wir die Werte von $\varkappa$ in den Ausdruck für D ein, so folgt

$$D \approx 1$$

(vgl. Aufgabe 2.12.).

2.16. Da sich das streuende Teilchen in zwei Energiezuständen ε_α ($\alpha = 1, 2$) befinden kann, läßt sich die Wellenfunktion des Systems folgendermaßen schreiben:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix}\psi_1(x)\\ \psi_2(x)\end{pmatrix}.$$

Der Energieoperator des Systems setzt sich aus der kinetischen Energie $p^2/2\mu$ des Elektrons, der Energie

$$\begin{pmatrix}\varepsilon_1 & 0\\ 0 & \varepsilon_2\end{pmatrix}$$

des streuenden Teilchens und der Wechselwirkungsenergie zusammen, die gleich dem hermiteschen Operator

$$q\,\delta(x)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

gesetzt werden kann.

Infolge der Wechselwirkung mit dem Elektron kann das Teilchen aus einem Energiezustand in den anderen übergehen.

Die SCHRÖDINGER-Gleichung lautet

$$\left\{\frac{p^2}{2\mu} + \begin{pmatrix}\varepsilon_1 & 0\\ 0 & \varepsilon_2\end{pmatrix} + q\,\delta(x)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix}\psi_1(x)\\ \psi_2(x)\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}\psi_1(x)\\ \psi_2(x)\end{pmatrix}.$$

Die Komponenten dieser Gleichung sind

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_1'' + q\psi_2(0)\delta(x) = (E - \varepsilon_1)\,\psi_1,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_2'' + q\psi_1(0)\delta(x) = (E - \varepsilon_2)\,\psi_2.$$

Wir nehmen an, daß sich das Elektron von links nach rechts bewegt und sich das Teilchen anfangs im Zustand ε_1 befindet. Dann ergibt sich für $x < 0$

$$\psi_1 = \mathrm{e}^{ik_1x} + A\,\mathrm{e}^{-ik_1x},$$

$$\psi_2 = B\,\mathrm{e}^{-ik_2x}, \quad k_\alpha = \sqrt{2\mu(E - \varepsilon_\alpha)/\hbar^2}$$

und für $x > 0$

$$\psi_1 = C\,\mathrm{e}^{ik_1x},$$

$$\psi_2 = D\,\mathrm{e}^{ik_2x}.$$

Aus den angegebenen Gleichungen folgt, daß ψ_α für

$$D = B,$$

$$1 + A = C$$

stetig ist und ψ_α' bei $x = 0$ einen Sprung erleidet:

$$\psi_1'(+0) - \psi_1'(-0) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\,q\psi_2(0),$$

$$\psi_2'(+0) - \psi_2'(-0) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\,q\psi_1(0).$$

Deshalb gilt

$$ik_1(C + A - 1) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\,qB,$$

$$2ik_2B = \frac{2\mu}{\hbar^2}\,qC$$

und folglich

$$C = \left\{1 + \left(\frac{\mu q}{\hbar}\right)^2\frac{1}{k_1k_2}\right\}^{-1}.$$

Die Wahrscheinlichkeit für den Durchgang ohne Anregung beträgt

$$W_d = C^2 = \left[1 + \left(\frac{\mu q}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{k_1 k_2}\right]^{-2},$$

und für die Wahrscheinlichkeit der Reflexion ohne Anregung ergibt sich

$$W_r = |A|^2 = |C - 1|^2 = \left[\frac{\left(\frac{\mu q}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{k_1 k_2}}{1 + \left(\frac{\mu q}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{k_1 k_2}}\right]^2.$$

Im Falle der Anregung sind schließlich Durchgang oder Reflexion gleich wahrscheinlich (die Wahrscheinlichkeit ist dem Strom und nicht $|\psi|^2$ proportional):

$$W_a = 2|B|^2 \frac{k_2}{k_1} = \frac{2\left(\frac{\mu q}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{k_1 k_2}}{\left[1 + \left(\frac{\mu q}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{k_1 k_2}\right]^2}.$$

3. VERTAUSCHUNGSREGELN. UNSCHÄRFERELATION. ZERFLIESSEN VON WELLENPAKETEN

3.1. Wir betrachten zunächst den Fall eines Satzes von Wellenfunktionen ψ_i für diskretes Spektrum. Die Mittelwerte der Operatoren A und B in dem durch die Funktion ψ $(\psi = \sum a_i \psi_i)$ charakterisierten Zustand sind

$$\bar{A} = \sum_{i,k} a_i^* A_{ik} a_k, \quad \bar{B} = \sum_{i,k} a_i^* B_{ik} a_k.$$

Wir führen die nichtnegative Größe $J(\lambda)$ ein:

$$J(\lambda) = \sum_i \{\sum_k (A_{ik} + i\lambda B_{ik}) a_k\}^* \{\sum_l (A_{il} + i\lambda B_{il}) a_l\} \geqq 0$$

(hierbei ist λ ein reeller Parameter).

Faßt man die Terme mit gleichen Potenzen von λ zusammen und beachtet, daß die Operatoren A und B hermitesch sind $(A_{ik} = A_{ki}^*,\ B_{ik} = B_{ki}^*)$, so findet man

$$J(\lambda) = \sum_{i,k,l} \{a_k^* A_{ki} A_{il} a_l + i\lambda a_k^*(A_{ki} B_{il} - B_{ki} A_{il}) a_l + \lambda^2 a_k^* B_{ki} B_{il} a_l\}$$

$$= \overline{A^2} - \lambda \bar{C} + \lambda^2 \overline{B^2}.$$

Dabei ist C der hermitesche Operator

$$C = \frac{1}{i}(AB - BA).$$

Da die quadratische Form $J(\lambda)$ nichtnegativ ist, gilt

$$4\overline{A^2}\,\overline{B^2} \geqq (\overline{C})^2.$$

Die Operatoren

$$\Delta A = A - \overline{A}$$

und

$$\Delta B = B - \overline{B}$$

genügen denselben Vertauschungsregeln wie A und B:

$$\Delta A \Delta B - \Delta B \Delta A = iC.$$

Man erhält

$$\sqrt{\overline{(\Delta A)^2}\,\overline{(\Delta B)^2}} \geqq \frac{|\overline{C}|}{2}.$$

Analog kann man diese Beziehung für einen kontinuierlichen Satz von Wellenfunktionen beweisen. Der Ausdruck

$$J(\lambda) = \int \{(A + i\lambda B)\,\psi\}^* \,\{(A + i\lambda B)\,\psi\}\, d\tau$$

(λ ist eine reelle Zahl) ist nichtnegativ und kann folgendermaßen umgeformt werden:

$$J(\lambda) = \int \{(A\psi)^* - i\lambda(B\psi)^*\}\,\{A\psi + i\lambda B\psi\}\, d\tau$$

$$= \int \{\psi^* A^2 \psi + i\lambda\psi^*(AB - BA)\,\psi + \lambda^2\psi^* B^2 \psi\}\, d\tau.$$

Tatsächlich gilt wegen der Hermitizität des Operators A

$$\int (A\psi^*)\varphi d\tau = \int \psi^* A \varphi d\tau.$$

Der restliche Teil des Beweises verläuft wie oben.

3.2. Gehen wir so wie bei der Lösung der vorigen Aufgabe vor und wählen λ komplex, so erhalten wir

$$\overline{(A)^2}\,\overline{(B)^2} \geqq \frac{(\bar{C}\sin\varphi + \bar{D}\cos\varphi)^2}{4},$$

wobei φ beliebig ist.

Mit

$$\bar{C} = \varrho \sin\alpha,$$

$$\bar{D} = \varrho \cos\alpha,$$

$$\varrho = \sqrt{(\bar{C})^2 + (\bar{D})^2}$$

folgt

$$\overline{(A)^2}\,\overline{(B)^2} \geqq \frac{\varrho^2}{4}\cos(\varphi - \alpha).$$

Da φ willkürlich ist, erhalten wir mit $\varphi = \alpha$ schließlich

$$\overline{(A)^2}\,\overline{(B)^2} \geqq \frac{(\bar{C})^2 + (\bar{D})^2}{4}.$$

3.3. $\overline{(\Delta q)^2}\,\overline{(\Delta F)^2} \geqq \frac{\hbar^2}{4}\overline{\left|\frac{\partial F}{\partial p}\right|}^2.$

3.4. Die Energie des Oszillators im stationären Zustand ist durch

$$E = \int \psi(x)\left\{\frac{1}{2\mu}p^2 + \frac{1}{2}kx^2\right\}\psi(x)\,dx = \frac{1}{2\mu}\overline{p^2} + \frac{k}{2}\overline{x^2}$$

gegeben. Wegen

$$\overline{p^2} = \overline{(p - \bar{p})^2} + (\bar{p})^2 = \overline{(\Delta p)^2} + (\bar{p})^2$$

$$\overline{x^2} = \overline{(\Delta x)^2} + (\bar{x})^2$$

und

$$\bar{p} = 0, \quad \bar{x} = 0$$

folgt

$$E = \frac{1}{2\mu}\overline{(\Delta p)^2} + \frac{k}{2}\overline{(\Delta x)^2}.$$

Aus der Unschärferelation

$$\overline{(\Delta p)^2}\,\overline{(\Delta x)^2} \geqq \frac{\hbar^2}{4}$$

ergibt sich

$$E \geqq \frac{\hbar^2}{8\mu\overline{(\Delta x)^2}} + \frac{k}{2}\overline{(\Delta x)^2}.$$

Der Ausdruck auf der rechten Seite dieser Gleichung nimmt für

$$\overline{(\Delta x)^2} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{1}{\mu k}}$$

ein Minimum an, so daß

$$E_{\min} \approx \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

folgt, wobei $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ die Frequenz des Oszillators ist.

3.5. Im betrachteten Fall kann man die Abschirmung des Kernfeldes durch die übrigen Elektronen vernachlässigen.

Die Energie des K-Elektrons beträgt

$$E = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}.$$

Wegen $p \approx \hbar/r$ (r gibt die Ausdehnung des Gebietes der Lokalisierung an) gilt

$$E \approx -\frac{\hbar^2}{2\mu\, r^2} - \frac{Ze^2}{r}. \tag{1}$$

Dieser Ausdruck hat ein Minimum bei

$$r = \frac{\hbar^2}{Ze^2\mu} = \frac{a}{Z}$$

($a = 0{,}529 \cdot 10^{-8}$ cm ist der Radius der ersten Bohrschen Bahn).

Man erhält die Energie

$$E \approx -\frac{Z^2}{2}\frac{\mu e^4}{\hbar^2} = -Z^2 \cdot 13{,}5\,\text{eV}.$$

Berücksichtigt man die relativistische Korrektion für die Massenänderung, so findet man statt (1)

$$E \geqq \{\mu_0^2 c^4 + c^2 p^2\}^{1/2} - \frac{Ze^2}{r} - \mu_0 c^2$$

$$\geqq \left\{\mu_0^2 c^4 + \frac{c^2\hbar^2}{r^2}\right\}^{1/2} - \frac{Ze^2}{r} - \mu_0 c^2.$$

Hieraus ergibt sich die Energie

$$E \geqq \mu_0 c^2\{(1 - \alpha^2 Z^2)^{1/2} - 1\} \quad \text{mit} \quad \alpha = e^2/\hbar c.$$

3.6. Die Abmessungen der Gebiete, in denen das erste bzw. zweite Elektron lokalisiert sind, seien r_1 bzw. r_2. Dann sind die Impulse der Elektronen auf Grund der Unschärferelation durch

$$p_1 \approx \frac{\hbar}{r_1} \quad \text{bzw.} \quad p_2 \approx \frac{\hbar}{r_2}$$

gegeben, so daß die kinetische Energie von der Größenordnung

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2}\right)$$

ist. Die potentielle Energie der Wechselwirkung zwischen den Elektronen und einem Kern mit der Ladung Z beträgt

$$-Ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right),$$

und die Wechselwirkungsenergie der Elektronen ist von der Größenordnung

$$\frac{e^2}{r_1 + r_2}.$$

Um die Energie des Grundzustandes zu bestimmen, betrachten wir die Gesamtenergie

$$E(r_1, r_2) = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2}\right) - Ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{r_1 + r_2},$$

welche für

$$r_1 = r_2 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}\frac{1}{Z - \frac{1}{4}}$$

ein Minimum annimmt. Die Energie des Grundzustandes eines Ions mit zwei Elektronen und der Kernladung Z beträgt also

$$E \approx -\left(Z - \frac{1}{4}\right)^2 \frac{\mu e^4}{\hbar^2} = -2\left(Z - \frac{1}{4}\right)^2 Ry,$$

$$1 Ry = \frac{1}{2}\frac{\mu e^4}{\hbar^2} = 13{,}5 \text{ eV}.$$

Vergleicht man mit den empirischen Daten, so ergibt sich eine in Anbetracht der einfachen Rechnung bemerkenswert gute Übereinstimmung.

	H^-	He	Li^+	Be^{2+}	B^{3+}	C^{4+}
E_{theor} (in Ry)	−1,125	−6,125	−15,12	−28,12	−45,12	−66,12
E_{exp} (in Ry)	−1,05	−5,807	−14,56	−27,31	−44,06	−64,8

3.7. Nein.

3.8. p_0 ist der Mittelwert des Teilchenimpulses.

3.9. Zum Beweise benutzen wir die Operatorbeziehung

$$\mathfrak{p} = \frac{i\mu}{\hbar}(H\mathfrak{r} - \mathfrak{r}H),$$

die für den Fall gilt, daß der HAMILTON-Operator nicht explizit von der Zeit abhängt und kein Magnetfeld vorhanden ist. Der Mittelwert von $\mathfrak{p}$ in dem zum diskreten Spektrum gehörigen Zustand ψ ist

$$\bar{\mathfrak{p}} = \frac{i\mu}{\hbar}\int \psi^*(H\mathfrak{r} - \mathfrak{r}H)\psi\, d\tau.$$

Wegen der Hermitizität von H folgt

$$\bar{\mathfrak{p}} = \frac{i\mu}{\hbar}\int \{H^*\psi^* \cdot \mathfrak{r}\psi - \psi^*\mathfrak{r}H\psi\}\, d\tau.$$

Da für einen stationären Zustand

$$H\psi = E\psi, \quad H^*\psi^* = E\psi^*$$

gilt, erhält man schließlich

$$\bar{\mathfrak{p}} = 0.$$

3.10. Die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ eines freien Teilchens ist mit $\psi(x, 0)$ durch die Beziehung

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty} a(p) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2\mu}t\right)\right\} dp$$

verknüpft, wobei

$$a(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) dx$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_0 - p)\,x\right) dx$$

ist. Die Funktion $a(p)$ ist nur für solche p-Werte wesentlich von Null verschieden, die der Bedingung

$$\frac{|p_0 - p|}{\hbar}\delta \lesssim 1$$

genügen. Ist diese Bedingung erfüllt, so ändert sich der oszillierende Faktor

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}(p_0 - p)\,x\right)$$

für die im Intervall

$$-\delta < x < +\delta$$

liegenden x-Werte nur wenig. Daher kann man $\psi(x, t)$ näherungsweise in der Form

$$\psi(x, t) \approx \frac{1}{(2\pi\,\hbar)^{1/2}} \int_{p_0 - \frac{\hbar}{\delta}}^{p_0 + \frac{\hbar}{\delta}} a(p) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2\mu}t\right)\right\} dp$$

oder

$$\psi(x, t) \approx \frac{1}{(2\pi\,\hbar)^{1/2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(p_0 x - \frac{p_0^2}{2\mu}t\right)\right\} \int_{-\frac{\hbar}{\delta}}^{+\frac{\hbar}{\delta}} a(p + p_0)$$

$$\times \exp\left\{+\frac{i}{\hbar}\left[p\left(x - \frac{p_0}{\mu}t\right) - \frac{p^2}{2\mu}t\right]\right\} dp$$

darstellen. Aus der letzten Beziehung folgt, daß die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ nur dann wesentlich von Null verschieden ist, wenn sich der oszillierende Faktor

$$\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p\left(x - \frac{p_0}{\mu}t\right) - \frac{p^2}{2\mu}t\right]\right\}$$

für die im Intervall $-\hbar/\delta < p < +\,\hbar/\delta$ liegenden p-Werte wenig ändert. Daher beträgt die Breite des Wellenpaketes im Zeitpunkt t größenordnungsmäßig

$$\delta_t \approx \delta + \frac{\hbar t}{2\mu\,\delta}.$$

3.11. Zur Lösung der Aufgabe ist es erforderlich, die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ zu bestimmen, die der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi \tag{1}$$

genügt und für $t = 0$ einen vorgegebenen Wert $\psi(x, 0)$ annimmt. Hängt H nicht explizit von der Zeit ab, so läßt sich die Lösung der Gl. (1) in der Form

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \tag{2}$$

schreiben, wobei $\psi_n(x)$ die zeitunabhängigen Eigenfunktionen des Operators H sind:

$$H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x).$$

Wir bestimmen nun die Entwicklungskoeffizienten von $\psi(x, 0)$ nach dem System der Eigenfunktionen $\psi_n(x)$:

$$\psi(x, 0) = \sum_n a_n\psi_n(x), \quad a_n = \int \psi_n^*(x)\, \psi(x, 0)\, dx.$$

Die Funktion

$$\sum_n a_n\psi_n(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

genügt der Gleichung (1) und stimmt für $t = 0$ mit $\psi(x, 0)$ überein.

Es gilt also

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n\psi_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar} t\right)$$

oder

$$\psi(x, t) = \int G_t(\xi, x)\, \psi(\xi, 0)\, d\xi \tag{3}$$

mit

$$G_t(\xi, x) = \sum_n \psi_n^*(\xi)\, \psi_n(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right).$$

Zur Lösung des Problems genügt es daher, die GREENsche Funktion $G_t(\xi, x)$ zu berechnen und die Gleichung (3) zu benutzen.

3.11.1. Im Falle der freien Bewegung erhält man die Eigenfunktionen

$$\psi_{\mathfrak{p}}(\mathfrak{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(i\frac{\mathfrak{p}\mathfrak{r}}{\hbar}\right), \quad E_p = \frac{\mathfrak{p}^2}{2\mu}$$

und die entsprechende GREENsche Funktion

$$G_t(\vec{\varrho}, \mathfrak{r}) = \int \frac{d\mathfrak{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\mathfrak{p}(\mathfrak{r} - \vec{\varrho}) - \frac{p^2 t}{2\mu}\right]\right\}.$$

$$= \left(\frac{\mu}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left[\frac{i\mu}{2\hbar t}(\mathfrak{r} - \vec{\varrho})^2\right].$$

Da laut Aufgabenstellung

$$\psi(\mathfrak{r}, 0) = \frac{1}{(\pi\delta^2)^{3/4}} \exp\left\{-\frac{\mathfrak{r}^2}{2\delta^2} + \frac{i\mathfrak{p}_0\mathfrak{r}}{\hbar}\right\}$$

gilt, erhält man

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = \int \left(\frac{\mu}{2\pi\, i\hbar t}\right)^{3/2} \frac{1}{(\pi\delta^2)^{3/4}}$$

$$\times \exp\left\{-\frac{\varrho^2}{2\delta^2} + \frac{i\mathfrak{p}_0\vec{\varrho}}{\hbar} + \frac{i\mu}{2\hbar t}(\mathfrak{r} - \vec{\varrho})^2\right\} d\vec{\varrho},$$

woraus folgt

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = \frac{1}{(\pi\delta^2)^{3/4}\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2\delta^4}\right)^{3/4}}$$

$$\times \exp\left\{-\frac{\left(\mathfrak{r} - \frac{\mathfrak{p}_0 t}{\mu}\right)^2}{2\delta^2\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2\delta^4}\right)}\left(1 - \frac{i\hbar t}{\mu\delta^2}\right) - \frac{i p_0^2 t}{2\mu\,\hbar} + \frac{i\mathfrak{p}_0\mathfrak{r}}{\hbar}\right\}.$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ergibt sich zu

$$\psi^*(\mathfrak{r}, t)\, \psi(\mathfrak{r}, t) = \left[\pi\delta^2\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2\delta^4}\right)\right]^{-3/2} \exp\left\{-\frac{\left(\mathfrak{r} - \frac{\mathfrak{p}_0 t}{\mu}\right)^2}{\delta^2\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2\delta^4}\right)}\right\}.$$

Dieser Ausdruck zeigt, daß sich der Schwerpunkt des Paketes mit der Geschwindigkeit $\mathfrak{p}_0/\mu$ bewegt. Die Abmessung δ_t des Paketes, die zu Beginn größenordnungsmäßig gleich δ ist, ändert sich zeitlich gemäß

$$\delta_t = \delta \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2\delta^4}}.$$

Die Verteilung im Ortsraum bleibt jedoch immer eine GAUSS-Verteilung. Schätzt man die Zeit τ ab, in welcher sich die Abmessungen des Paketes um die Größenordnung seiner anfänglichen Abmessungen ändern, so erhält man

$$\tau \approx \frac{\delta^2\mu}{\hbar}.$$

Für $t \gg \tau$ wachsen die linearen Abmessungen des Wellenpaketes proportional der Zeit:

$$\delta_t \approx \frac{\hbar}{\mu\delta} t.$$

Wir betrachten einige Beispiele.

Für ein Elektron, das zu Beginn in einem Gebiet von $\delta \approx 10^{-8}$ cm lokalisiert ist, ergibt sich τ größenordnungsmäßig zu 10^{-16} s. Für ein „klassisches" Teilchen mit $\mu = 1$ g und $\delta = 10^{-5}$ cm findet man $\tau = 10^{17}$ s ≈ 3 Milliarden Jahre.

3.11.2. Für den Fall der eindimensionalen Bewegung eines Teilchens im homogenen Feld $V = -Fx$ lauten die Wellenfunktionen (vgl. Aufgabe 1.14.)

$$\psi_E(x) = A \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[i\left(\frac{1}{3}u^3 - uq\right)\right] du, \quad q = \left(x + \frac{E}{F}\right)\alpha$$

mit

$$\alpha = \left(\frac{2\mu F}{\hbar^2}\right)^{1/3}, \quad A = \frac{\alpha}{2\pi\sqrt{F}}.$$

Für die GREENsche Funktion ergibt sich

$$G_t(\xi, x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \psi_E^*(\xi)\, \psi_E(x)$$

$$= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$$

$$\times \iint_{-\infty}^{+\infty} du\, dv \exp\left[-i\left(\frac{v^3}{3} - v\eta\right) + i\left(\frac{u^3}{3} - uq\right)\right]$$

mit

$$\eta = \left(\xi + \frac{E}{F}\right)\alpha.$$

Wir integrieren zunächst über E:

$$G_t(\xi, x) = A^2 \iint_{-\infty}^{+\infty} du\, dv \exp\left[-i\left(\frac{v^3}{3} - \frac{u^3}{3} - v\xi\alpha + ux\alpha\right)\right]$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} dE \exp\left[-i\frac{E\alpha}{F}\left(u + \frac{Ft}{\alpha\hbar} - v\right)\right]$$

$$= A^2 \iint_{-\infty}^{+\infty} du\, dv \exp\left[-i\left(\frac{v^3}{3} - \frac{u^3}{3} - v\xi\alpha + ux\alpha\right)\right]$$

$$\times \frac{2\pi F}{\alpha}\delta\left(u + \frac{Ft}{\alpha\hbar} - v\right).$$

Unter Beachtung der Eigenschaften der δ-Funktion führen wir die Integration über v aus und formen den Ausdruck im Exponenten auf eine für die nachfolgende Integration über u besonders geeignete Weise um:

$$G_t(\xi, x) = \frac{2\pi F}{\alpha} A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} du \exp\left\{-i\frac{Ft}{\alpha\hbar}\left[u + \frac{Ft}{2\alpha\hbar} + \frac{\alpha^2\hbar}{2Ft}(x-\xi)\right]^2\right.$$

$$\left. - \frac{i}{12}\left(\frac{Ft}{\alpha\hbar}\right)^3 + \frac{i}{2}\frac{Ft}{\hbar}(x+\xi) + \frac{i\alpha^3\hbar}{4Ft}(x-\xi)^2\right\}.$$

Für die GREENsche Funktion folgt schließlich

$$G_t(\xi, x) = \left(\frac{\mu}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{i}{12}\left(\frac{Ft}{\hbar\alpha}\right)^3 + \frac{iFt}{2\hbar}(x+\xi) + \frac{i\mu}{2\hbar t}(x-\xi)^2\right\}.$$

Für $F \to 0$ geht dieser Ausdruck erwartungsgemäß in die GREENsche Funktion der freien eindimensionalen Bewegung über. Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion, die für $t = 0$ vorgegeben ist:

$$\psi(x, 0) = (\pi\delta^2)^{-1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2\delta^2} + \frac{ip_0 x}{\hbar}\right),$$

kann mit Hilfe von (3) bestimmt werden:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\left\{\pi\delta^2\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2\delta^4}\right)\right\}^{1/4}} \exp\left\{-\frac{\left(x - \frac{p_0 t}{\mu} - \frac{Ft^2}{2\mu}\right)^2}{2\delta^2\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2\delta^4}\right)}\left(1 - \frac{i\hbar t}{\mu\delta^2}\right)\right.$$

$$\left. + \frac{i}{\hbar}(p_0 + Ft)\, x - \frac{i}{\hbar}\int_0^t \frac{1}{2\mu}(p_0 + Ft)^2\, dt\right\}.$$

Für den allgemeinen Fall der dreidimensionalen Bewegung im homogenen Feld mit der Wellenfunktion

$$\psi(\mathfrak{r}, 0) = (\pi\delta^2)^{-3/4} \exp\left[-\frac{\mathfrak{r}^2}{2\delta^2} + \frac{i\mathfrak{p}_0\mathfrak{r}}{\hbar}\right]$$

für $t = 0$ findet man

$$\psi(\mathfrak{r}, t) = \left\{\pi\delta^2\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2\delta^4}\right)\right\}^{-3/4} \exp\left\{-\frac{\left(\mathfrak{r} - \frac{\mathfrak{p}_0 t}{\mu} - \frac{\mathfrak{F}t^2}{2\mu}\right)^2}{2\delta^2\left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2\delta^4}\right)}\left(1 - \frac{i\hbar t}{\mu\delta^2}\right)\right.$$

$$\left. + \frac{i}{\hbar}(\mathfrak{p}_0 + \mathfrak{F}t)\,\mathfrak{r} - \frac{i}{\hbar}\int_0^t \frac{1}{2\mu}(\mathfrak{p}_0 + \mathfrak{F}t)^2\, dt\right\}.$$

Wie aus diesem Ausdruck hervorgeht, bleibt die Verteilung der Wahrscheinlichkeitsdichte eine GAUSS-Verteilung, während sich der Schwerpunkt des Wellenpaketes gemäß den Gesetzen der klassischen Mechanik mit konstanter Beschleunigung bewegt. Die zeitliche Änderung der Abmessungen des Wellenpaketes erfolgt genauso wie im feldfreien Fall (vgl. 3.11.1.).

3.11.3. Die Eigenfunktionen der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_n'' + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \psi_n = E_n \psi_n$$

lauten

$$\psi_n(x) = c_n \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right) H_n(\alpha x)$$

mit

$$\alpha = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2}, \quad c_n^2 = \frac{1}{2^n n!}\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}, \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Die gesuchte Wellenfunktion ergibt sich nach (2) zu

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n \psi_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right), \tag{4}$$

wobei

$$a_n = c_n c \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\alpha x) \exp\left\{-\alpha^2 \frac{(x - x_0)^2}{2} + \frac{i}{\hbar}p_0 x - \frac{\alpha^2 x^2}{2}\right\} dx$$

ist. Zur Berechnung von a_n benutzen wir den Ausdruck für die Erzeugende der TSCHEBYSCHEFF-HERMITEschen Polynome:

$$e^{-\lambda^2 + 2\lambda\eta} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} H_n(\eta). \tag{5}$$

Entwickelt man

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\lambda^2 + 2\lambda\alpha x - \frac{1}{2}\alpha^2(x - x_0)^2 + \frac{i}{\hbar}p_0 x - \frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right\} dx$$

in eine Potenzreihe nach λ, so erkennt man sofort, daß $a_n/c_n c$ der Koeffizient von $\lambda^n/n!$ ist. Man erhält

$$a_n = c_n c \sqrt{\pi}\left(\alpha x_0 + \frac{ip_0}{\alpha\hbar}\right)^n \exp\left\{-\frac{1}{2}\alpha^2 x_0^2 + \frac{1}{4}\left(\alpha x_0 + \frac{ip_0}{\alpha\hbar}\right)^2\right\}.$$

Setzt man diesen Ausdruck in (4) ein, so zeigt sich, daß die Summation über n unter nochmaliger Benutzung der Beziehung (5) ausgeführt werden kann.

Es folgt

$$\psi(x, t) = c \exp\left\{-\frac{\alpha^2}{2}[x - Q\cos(\omega t + \delta)]^2 - ixQ\alpha^2 \sin(\omega t + \delta) - \frac{i\omega t}{2} + \frac{\alpha^2 Q^2}{4} i [\sin 2(\omega t + \delta) - \sin 2\delta]\right\}$$

mit

$$x_0 + \frac{ip_0}{\hbar\alpha^2} = Q\, e^{-i\delta}.$$

Im betrachteten Fall zerfließt das Wellenpaket während der Bewegung nicht. Der Schwerpunkt bewegt sich von vornherein nach den Gesetzen der klassischen Mechanik und führt harmonische Schwingungen mit der Amplitude Q und der Frequenz ω aus. Aus dem für ψ gewonnenen Ausdruck folgt ferner der mittlere Impuls zur Zeit t

$$P(t) = \hbar Q\alpha^2 \sin(\omega t + \delta).$$

Das ist gerade der klassische Impuls eines Oszillators.

Die Größe

$$\exp\left\{-\frac{1}{2} i\omega t + \frac{\alpha^2 Q^2}{4} i [\sin 2(\omega t + \delta) - \sin 2\delta]\right\}$$

kann zu

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \frac{1}{2\mu} P^2(t)\, dt\right\}$$

umgeformt werden.

3.12. Wir betrachten den Operator

$$a(s) = e^{sL}\, a\, e^{-sL}$$

(s ist ein Hilfsparameter) und stellen eine Differentialgleichung für $a(s)$ auf:

$$\frac{da(s)}{ds} = L\, e^{sL}\, a\, e^{-sL} - e^{sL}\, a\, e^{-sL} L = [L, a(s)].$$

Differenziert man diese Gleichung nochmals, so erhält man

$$\frac{d^2 a(s)}{ds^2} = \left[L, \frac{da(s)}{ds}\right] = [L, [L, a(s)]].$$

Man erkennt, daß die Ableitung $\frac{d^n a(s)}{ds^n}$ gleich dem Ergebnis von n nacheinander ausgeführten Vertauschungen des Operators L mit dem Operator $a(s)$ ist.

Schreibt man nun den Operator

$$e^L a\, e^{-L} = a(1)$$

als TAYLOR-Reihe

$$a(1) = a(0) + \frac{da(0)}{ds} + \frac{1}{2!}\frac{d^2a(0)}{ds^2} + \cdots$$

und drückt die Ableitungen nach s im Punkt $s = 0$ durch nacheinander ausgeführte Vertauschungen des Operators L mit $a(0) = a$ aus, so kann man die in der Aufgabe angegebene Beziehung beweisen.

3.13. Wir drücken den HAMILTON-Operator

$$H = \frac{1}{2\mu}p^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 - f(t)\,x$$

durch die Operatoren a und a^+ aus (vgl. Aufgabe 1.6.):

$$H = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right) - f(t)\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\,\omega}}\,(a + a^+),$$

und machen für die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar\dot{\psi}(t) = H\psi(t)$$

den Ansatz

$$\psi(t) = c(t)\exp\,[\alpha(t)a^+]\exp\,[\beta(t)a]\exp\,[\gamma(t)a^+a]\,\psi(-\infty).$$

Bei der Differentiation des auf $\psi(-\infty)$ wirkenden Operators nach t haben wir darauf zu achten, daß a und a^+ nicht vertauschbar sind:

$$aa^+ - a^+a = [a, a^+] = 1.$$

Wir transformieren den Ausdruck für die zeitliche Ableitung

$$\begin{aligned}\dot{\psi} = [&\dot{c}\exp(\alpha a^+)\exp(\beta a)\exp(\gamma a^+a)\\ &+ c\dot{\alpha}a^+\exp(\alpha a^+)\exp(\beta a)\exp(\gamma a^+a)\\ &+ c\dot{\beta}\exp(\alpha a^+)\,a\exp(\beta a)\exp(\gamma a^+a)\\ &+ c\dot{\gamma}\exp(\alpha a^+)\exp(\beta a)a^+a\exp(\gamma a^+a)]\,\psi(-\infty)\end{aligned}$$

auf die Form

$$\dot{\psi} = G\exp(\alpha a^+)\exp(\beta a)\exp(\gamma a^+a)\,\psi(-\infty),$$

wobei G ein noch zu bestimmender Operator ist. Wir betrachten zunächst den dritten Term auf der rechten Seite der Gleichung für $\dot{\psi}$.

Mit

$$[(a^+)^n, a] = -n(a^+)^{n-1}$$

folgt

$$\exp(\alpha a^+)a = \left(1 + \alpha a^+ + \frac{1}{2}(\alpha a^+)^2 + \ldots\right) a$$

$$= (a - \alpha)\left(1 + \alpha a^+ + \frac{1}{2}(\alpha a^+)^2 + \ldots\right)$$

$$= (a - \alpha)\exp(\alpha a^+).$$

Daher können wir für den dritten Term schreiben

$$c\dot{\beta}(a - \alpha)\exp(\alpha a^+)\exp(\beta a)\exp(\gamma a^+ a)\,\psi(-\infty).$$

Analog formen wir den letzten Term um:

$$c\dot{\gamma}\exp(\alpha a^+)\exp(\beta a)\,a^+ a\exp(\gamma a^+ a)$$

$$= c\dot{\gamma}\exp(\alpha a^+)\,(a^+ a + \beta a)\exp(\beta a)\exp(\gamma a^+ a)$$

$$= c\dot{\gamma}(a^+ a - \alpha a^+ + \beta a - \alpha\beta)\exp(\alpha a^+)\exp(\beta a)\exp(\gamma a^+ a).$$

Wir finden

$$G = c\dot{\gamma}a^+ a + c(\dot{\alpha} - a\dot{\gamma})a^+ + c(\dot{\beta} + \beta\dot{\gamma})a + \dot{c} - c\dot{\gamma}\alpha\beta - c\dot{\beta}\alpha$$

und müssen fordern

$$i\hbar G = H,$$

damit die Schrödinger-Gleichung erfüllt ist. Vergleichen wir die vor den Operatoren a^+a, a, a^+ stehenden Koeffizienten und die freien Terme miteinander, so gelangen wir zu dem Gleichungssystem

$$\dot{\gamma} = -i\omega,$$

$$\dot{\alpha} + i\omega\alpha = \frac{i}{\sqrt{2\hbar\,\mu\omega}}f(t),$$

$$\dot{\beta} - i\omega\beta = \frac{i}{\sqrt{2\hbar\,\mu\omega}}f(t),$$

$$\frac{\dot{c}}{c} = -i\frac{\omega}{2} + \alpha(\dot{\beta} - i\omega\beta),$$

dessen Lösung sich mit Rücksicht auf die Anfangsbedingungen

$$\alpha(-\infty) = 0, \quad \beta(-\infty) = 0, \quad |c(-\infty)| = 1$$

zu

$$\alpha(t) = \frac{i \exp(-i\omega t)}{\sqrt{2\hbar\,\mu\omega}} \int_{-\infty}^{t} f(t')\, e^{i\omega t'}\, dt',$$

$$\beta(t) = \frac{i \exp(+i\omega t)}{\sqrt{2\hbar\,\mu\omega}} \int_{-\infty}^{t} f(t')\, e^{-i\omega t'}\, dt' = -\alpha^*(t),$$

$$\gamma(t) = -i\omega t,$$

$$c(t) = \exp\left(-\frac{i}{2}\,\omega t\right)$$

$$\times \exp\left\{-\frac{1}{2\hbar\,\mu\omega} \int_{-\infty}^{t} dt' f(t')\, e^{-i\omega t'} \int_{-\infty}^{t'} dt'' f(t'')\, e^{i\omega t''}\right\}.$$

ergibt. Die Wahrscheinlichkeit für den Übergang aus dem Zustand $\psi(-\infty)$ in den n-ten angeregten Zustand bei $t \to +\infty$ beträgt

$$W_n = \lim_{t\to\infty} \left| \int \psi_n^* \psi(t) dx \right|^2$$

$$= \lim_{t\to\infty} \left| c \int \psi_n^* \exp(\alpha a^+) \exp(\beta a) \exp(\gamma a^+ a)\, \psi(-\infty)\, dx \right|^2 .$$

Ist der Anfangszustand der Grundzustand ($\psi(-\infty) = \psi_0$), so finden wir wegen $a\psi_0 = 0$

$$\exp(\beta a) \exp(\gamma a^+ a)\, \psi_0 = \psi_0 .$$

Da die normierten Wellenfunktionen von der Form

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n\, \psi_0$$

sind (vgl. Aufgabe 1.6.3.), gilt ferner

$$\exp(\alpha a^+)\, \psi_0 = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}}\, \psi_m .$$

Mit Hilfe der Orthogonalitätsrelation

$$\int \psi_n^* \psi_m\, dx = \delta_{nm}$$

erhalten wir

$$W_{n0} = \lim_{t\to\infty} |c(t)|^2 \frac{|\alpha(t)|^{2n}}{n!} .$$

Aus den Formeln für $\alpha(t)$ und $c(t)$ folgt

$$\lim_{t\to\infty} |\alpha(t)|^2 = \frac{1}{2\hbar\mu\omega}\left|\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\, e^{i\omega t}\, dt\right|^2 \equiv \nu,$$

$$\lim_{t\to\infty} |c(t)|^2 = \exp\left\{-\frac{1}{2\hbar\mu\omega}\left|\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\, e^{i\omega t}\, dt\right|^2\right\} = e^{-\nu}.$$

Damit ergibt sich für W_{n0} eine POISSON-Verteilung:

$$W_{n0} = e^{-\nu}\frac{\nu^n}{n!}$$

mit

$$\nu = \frac{1}{2\hbar\mu\omega}\left|\int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\, e^{i\omega t}\, dt\right|^2.$$

3.13.1. Für

$$f(t) = f_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)$$

finden wir

$$\nu = \frac{\pi f_0^2 \tau^2}{2\hbar\mu\omega}\exp\left(-\frac{1}{2}\omega^2\tau^2\right).$$

3.13.2. Für

$$f(t) = f_0\left[1 + \frac{t^2}{\tau^2}\right]^{-1}$$

erhält man

$$\nu = \frac{\pi^2 f_0^2 \tau^2}{2\hbar\mu\omega} e^{-2\omega\tau}.$$

3.14. Die SCHRÖDINGER-Gleichung des Oszillators lautet unter Berücksichtigung der Störkraft

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\mu\omega^2 x^2}{2}\psi - f(t)\, x\psi.$$

Mit der neuen Koordinate $x_1 = x - \xi(t)$ folgt

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = i\hbar\dot{\xi}\frac{\partial\psi}{\partial x_1} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2(x_1 + \xi)^2\psi - f(t)(x_1 + \xi)\psi.$$

Setzen wir

$$\psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mu\dot{\xi}x_1\right)\varphi(x_1, t),$$

so erhalten wir für φ die Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x_1^2\varphi + (\mu\ddot{\xi} + \mu\omega^2\xi - f)\,x_1\varphi - L\varphi, \qquad (1)$$

wobei L die LAGRANGE-Funktion ist:

$$L = \frac{1}{2}\mu\dot{\xi}^2 - \frac{1}{2}\mu\omega^2\xi^2 + f(t)\xi.$$

In der Gl. (1) verschwindet der Term

$$(\mu\ddot{\xi} + \mu\omega^2\xi - f)x_1\varphi,$$

da ξ als Funktion der Zeit der klassischen Bewegungsgleichung des Oszillators mit Störkraft genügt:

$$\mu\ddot{\xi} + \mu\omega^2\xi = f(t).$$

Führen wir mit

$$\varphi = \chi\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_0^t L\,dt\right)$$

die neue Funktion χ ein, so erhalten wir die Bewegungsgleichung des ungestörten Oszillators:

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\chi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x_1^2\chi.$$

Die Wellenfunktion des Oszillators mit Störkraft kann also in der Form

$$\psi(x, t) = \chi[x - \xi(t), t]\exp\left\{\frac{i\mu}{\hbar}\dot{\xi}(x - \xi) + \frac{i}{\hbar}\int_0^t L\,dt\right\}$$

dargestellt werden.

3.15. Wir setzen die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2(t)\,x^2\psi \qquad (1)$$

in der Form

$$\psi(x, t) = \int G(x, t; x', \tau)\,\psi(x', \tau)\,dx'$$

an. Man zeigt leicht, daß die GREENsche Funktion $G(x, t; x', \tau)$ der Gleichung (1) und der Anfangsbedingung

$$\lim_{t \to \tau + 0} G(x, t; x', \tau) = \delta(x - x') \tag{2}$$

genügt. Wir versuchen, diesen beiden Bedingungen mit Hilfe des Ansatzes

$$G(x, t; x', \tau) \sim \exp\left\{\frac{i}{2\hbar}[a(t)\,x^2 + 2b(t)x + c(t)]\right\} \tag{3}$$

zu genügen. Setzen wir (3) in (1) ein, so erhalten wir Gleichungen für a, b, c:

$$\left.\begin{aligned} \frac{1}{\mu}\frac{da}{dt} &= -\frac{a^2}{\mu^2} - \omega^2(t), \\ \frac{db}{dt} &= -\frac{a}{\mu}\,b, \\ \frac{dc}{dt} &= i\hbar\frac{a}{\mu} - \frac{b^2}{\mu}. \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

Die Lösung des Gleichungssystems (4) lautet

$$a = \mu\frac{\dot Z}{Z}, \quad b = \frac{\text{const}}{Z}, \quad c = i\hbar \ln Z - \frac{1}{\mu}\int^t b^2\,dt, \tag{5}$$

wobei Z eine Lösung der Differentialgleichung

$$\ddot Z = -\omega^2(t)\,Z$$

ist. Wir versuchen nun, der Anfangsbedingung (2) durch geeignete Wahl der Integrationskonstanten zu genügen. Dazu benutzen wir eine der möglichen Darstellungen der δ-Funktion (vgl. Aufgabe 3.11.1.):

$$\delta(x - x') = \lim_{t \to \tau}\sqrt{\frac{\mu}{2\pi i\hbar(t - \tau)}}\exp\left\{\frac{i\mu}{2\hbar(t - \tau)}(x - x')^2\right\}. \tag{6}$$

Damit der Ausdruck (3) für $t \to \tau$ in (6) übergeht, ist notwendig und hinreichend, daß gilt

$$Z = 0, \; \dot Z = 1 \quad \text{für} \quad t = \tau,$$

$$b = -\frac{\mu x'}{Z}, \quad c = i\hbar \ln Y + \mu x'^2\frac{Y}{Z},$$

wobei Y die Lösung der Differentialgleichung

$$\ddot Y = -\omega^2(t)\,Y$$

ist, die den Anfangsbedingungen

$$Y = 1, \quad \dot{Y} = 0 \quad \text{für} \quad t = \tau$$

genügt.

Wir bemerken, daß wegen

$$\dot{Z}Y - \dot{Y}Z = 1$$

gilt

$$\frac{Y}{Z} = -\int \frac{dt}{Z^2}.$$

Die GREENsche Funktion des betrachteten Problems erhalten wir also in der Form

$$G(x, t; x', \tau) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i\hbar Z}} \exp\left\{\frac{i\mu}{2\hbar\, Z}(\dot{Z}x^2 - 2xx' + \dot{Y}x'^2)\right\}.$$

Im Falle $\omega = \text{const}$ haben wir

$$Z = \frac{1}{\omega}\sin\omega(t-\tau), \quad Y = \cos\omega(t-\tau)$$

und die GREENsche Funktion

$$G(x, t; x', \tau) = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\pi\,\hbar i \sin\omega(t-\tau)}} \exp\left\{\frac{i\mu\omega}{2\hbar\sin\omega(t-\tau)}\right.$$
$$\left. \times \left(\cos\omega(t-\tau)x^2 - 2x\,x' + \cos\omega(t-\tau)x'^2\right)\right\}.$$

3.16. Es gilt

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}\left(\cos^2\omega t + \frac{\alpha^4\hbar^2}{\mu^2\omega^2}\sin^2\omega t\right)^{-1/2}$$
$$\times \exp\left\{-\frac{\alpha^2(x - Q\cos(\omega t + \delta))^2}{\cos^2\omega t + \dfrac{\alpha^4\hbar^2}{\mu^2\omega^2}\sin^2\omega t}\right\}$$

mit

$$x_0 + i\frac{p_0}{\mu\omega} = Q\,e^{-i\delta}.$$

Für den Fall $\alpha = \sqrt{\mu\omega/\hbar}$ ergibt sich das Resultat der Aufgabe 3.11.3.

3.17. Wir erhalten

$$G(x, t; x', \tau) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i\hbar Z}} \exp\left\{\frac{i\mu}{2\hbar Z}[\dot{Z}(x-\xi)^2 - 2(x-\xi)x' + Yx'^2] + \frac{i}{\hbar}\mu\dot{\xi}(t)(x-\xi) + \frac{i}{\hbar}\int_\tau^t L\,dt\right\}.$$

Die in diesem Ausdruck vorkommende Größe ξ genügt der Gleichung

$$\mu\ddot{\xi} = -\mu\omega^2\xi + f(t)$$

und den Anfangsbedingungen $\xi(\tau) = 0$, $\dot{\xi}(\tau) = 0$. L ist die LAGRANGE-Funktion:

$$L = \frac{1}{2}\mu\dot{\xi}^2 - \frac{1}{2}\mu\omega^2\xi^2 + f\xi.$$

3.18. Die Übergangswahrscheinlichkeit aus dem n-ten in den m-ten Zustand beträgt (im Maßsystem mit $\hbar = 1$, $\mu = 1$, $\omega = 1$)

$$P_{mn}(t, 0) = |G_{mn}(t, 0)|^2, \tag{1}$$

wobei

$$G_{mn}(t, 0) = \iint \psi_m^*(x)\, G(x, t; x', 0)\, \psi_n(x')\, dx\, dx'$$

ist. Mit Hilfe der Erzeugenden

$$\exp\left\{-\frac{1}{2}(2z^2 + x^2 - 4zx)\right\} = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2^n\sqrt{\pi}}{n!}}\, z^n\psi_n(x)$$

konstruieren wir die Funktion $G(u, v)$:

$$G(u, v) = \iint \exp\left\{-\frac{1}{2}(2v^2 + x^2 - 4vx) - \frac{1}{2}(2u^2 + x'^2 - 4ux')\right\} G(x, t; x', 0)\, dx\, dx'$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\pi\, 2^{n+m}}{n!m!}}\, v^m u^n G_{mn}(t, 0). \tag{2}$$

Der Ausdruck (2) zeigt, daß die Größen $G_{ij}(t, 0)$, deren Betragsquadrate die Übergangswahrscheinlichkeiten bestimmen, bis auf die Faktoren

$$\sqrt{\frac{\pi\, 2^{i+j}}{i!j!}}$$

gleich den Koeffizienten der Potenzreihe von $G(u, v)$ in u und v sind.

Zur Berechnung von $G(u, v)$ setzen wir den Ausdruck für die GREENsche Funktion G (vgl. Aufgabe 3.17.) in (2) ein:

$$G(u, v) = (2\pi\, iZ)^{-1/2} \exp\left\{i \int_0^t L\, dt - i\xi\dot{\xi} + \frac{i\dot{Z}}{2Z}\xi^2 - u^2 - v^2\right\}$$

$$\times \iint \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\left(1 - \frac{i\dot{Z}}{Z}\right)x^2 + \frac{2i}{Z}xx' + \left(1 - \frac{iY}{Z}\right)x'^2\right.\right.$$

$$\left.\left. - 2\left(2v - \frac{i\dot{Z}}{Z}\xi + i\dot{\xi}\right)x - 2\left(2u + \frac{i\xi}{Z}\right)x'\right]\right\} dx\, dx'.$$

Im Falle $\omega = \text{const}$ erhalten wir

$$\xi(t) = \int_0^t \sin(t - t') f(t')\, dt', \quad Z = \sin t, \quad Y = \cos t.$$

Bei der Berechnung des Integrals benutzen wir die Formel

$$\iint_{-\infty}^{+\infty} dx\, dy \exp\left\{-\frac{1}{2}(ax^2 + 2bxy + cy^2 - 2px - 2qy)\right\}$$

$$= \frac{2\pi}{\sqrt{ac - b^2}} \exp\left\{\frac{aq^2 - 2b\, pq + cp^2}{2(ac - b^2)}\right\}.$$

Einfache Umformungen führen auf

$$G(u, v) = \sqrt{\pi}\, e^{iF(t)}\, e^{-w/2} \exp\left\{-\frac{AB}{w}uv + Au + Bv\right\},$$

wobei

$$A = i\int_0^t e^{-it'} f(t')\, dt', \quad B = e^{-it}A, \quad 2w = |A| \cdot |B| = \dot{\xi}^2 + \xi^2$$

gilt und $F(t)$ eine reelle Funktion der Zeit ist.

Zur Entwicklung von $G(u, v)$ in eine Potenzreihe benutzen wir die Beziehung

$$\exp\left\{\alpha + \beta - \frac{\alpha\beta}{w}\right\} = \sum_{m,n=0}^{\infty} c(m, n \mid w) \frac{\alpha^m}{m!} \frac{\beta^n}{n!}$$

mit

$$c(m, n \mid w) = \sum_{l=0}^{\min(m,n)} \frac{m!\, n!}{l!\,(m - l)!\,(n - l)!}(-w)^{-l}.$$

Wir erhalten

$$G(u, v) = \sqrt{\pi}\, e^{iF(t)}\, e^{-w/2} \sum_{m,n=0}^{\infty} c(m, n \mid w) \frac{(Bv)^m}{m!} \frac{(Au)^n}{n!}. \tag{3}$$

Aus den Beziehungen (2) und (3) folgt

$$G_{mn}(t, 0) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2} w\right) A^n B^m}{\sqrt{2^{n+m} m!\, n!}}\, c(m, n \mid w)\, e^{iF(t)},$$

und die zu bestimmende Übergangswahrscheinlichkeit ergibt sich zu

$$P_{mn}(t, 0) = \frac{e^{-w}\, w^{m+n}}{m!\, n!} \{c(m, n \mid w)\}^2.$$

Im Sonderfall $n = 0$ erhalten wir die Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{m0}(t, 0) = \frac{e^{-w}\, w^m}{m!} \quad \text{wegen} \quad c(m, 0 \mid w) = 1.$$

Mit diesem Ausdruck lassen sich die Mittelwerte der Energie und des Quadrates der Energie für den Oszillator im Zeitpunkt t bestimmen:

$$\bar{E} = \sum_{m=0}^{\infty} P_{mn}(t, 0) \left(m + \frac{1}{2}\right),$$

$$\overline{E^2} = \sum_{m=0}^{\infty} P_{mn}(t, 0) \left(m + \frac{1}{2}\right)^2.$$

Zur Berechnung solcher Summen betrachten wir den Ausdruck

$$\left(1 - \frac{\alpha}{w}\right)^m e^{\alpha} = \Phi(m, \alpha \mid w).$$

Man zeigt leicht

$$\Phi(m, \alpha \mid w) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} c(m, n \mid w).$$

Aus der Gleichung

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{e^{-w}\, w^m}{m!} \Phi(m, \alpha \mid w)\, \Phi(m, \beta \mid w) = e^{\alpha\beta/w}$$

folgt

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{e^{-w}\, w^m}{m!} c(m, n \mid w)\, c(m, n' \mid w) = \delta_{nn'}\, n!\, w^{-n},$$

woraus wir unmittelbar das physikalisch evidente Resultat

$$\sum_{m=0}^{\infty} P_{mn} = 1$$

erhalten. Differenzieren wir die Gleichung

$$\sum_{m=0}^{\infty} m \frac{e^{-w} w^m}{m!} \Phi(m, \alpha \mid w) \Phi(m, \beta \mid w) = \left\{ w - \alpha - \beta + \frac{\alpha\beta}{w} \right\} e^{\alpha\beta/w}$$

n-mal nach α und m-mal nach β und setzen $\alpha = 0$, $\beta = 0$, so erhalten wir

$$\sum_{m=0}^{\infty} m P_{mn} = n + w.$$

Als Mittelwert der Oszillatorenergie im Zeitpunkt t ergibt sich somit

$$\overline{E} = E_n + w.$$

Dabei ist w die in der Zeit t von der Kraft $f(t)$ geleistete Arbeit:

$$w = \int_0^t f(t)\, \dot{\xi}\, dt = \int_0^t (\ddot{\xi} + \xi)\, \dot{\xi}\, dt = \frac{1}{2}(\dot{\xi}^2 + \xi^2)_{t=t} - \frac{1}{2}(\dot{\xi}^2 + \xi^2)_{t=0}.$$

Analog findet man

$$\overline{E^2} = 2wE_n.$$

3.21. Man erhält

3.21.1. $x(t) = x - \frac{i\hbar}{\mu} t \frac{\partial}{\partial x};$

3.21.2. $x(t) = x \cos \omega t - \frac{i\hbar}{\mu\omega} \sin \omega t \frac{\partial}{\partial x}.$

3.22. Es gilt

$$\overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_0^2} + \frac{t}{\mu} \overline{[(\Delta p)(\Delta x) + (\Delta x)(\Delta p)]_0} + \frac{t^2}{\mu^2} \overline{(\Delta p)_0^2}.$$

Anmerkung. Mit Hilfe der angegebenen Beziehung läßt sich leicht der Zeitpunkt τ bestimmen, in dem die Größe $\overline{(\Delta x)^2}$ ein Minimum annimmt. Die Funktion $\overline{(\Delta x)_t^2}$ ist bezüglich τ symmetrisch. Besitzt die Wellenfunktion im Zeitpunkt $t = 0$ die Form

$$\psi(x) = \varphi(x) \exp(ip_0 x/\hbar)$$

($\varphi(x)$ ist eine reelle Funktion), so folgt $\tau = 0$ (vgl. Aufgabe 3.11.1.).

3.23. Man findet

3.23.1. $$\overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_{t=0}^2} + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)^2 dx,$$

3.23.2. $$\overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_{t=0}^2} \cos^2 \omega t + \frac{\hbar^2}{\mu^2 \omega^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)^2 \sin^2 \omega t \, dx.$$

4. DREHIMPULS. SPIN

4.1. Bekanntlich transformiert sich die Wellenfunktion bei infinitesimaler Drehung des Koordinatensystems wie folgt:

$$\psi'(\mathfrak{r}) = \{1 + i\, d\vec{\alpha}\, \mathfrak{l}\}\, \psi(\mathfrak{r}). \tag{1}$$

Dabei sind $d\vec{\alpha}$ ein Vektor, der die Richtung der Drehachse hat und dem Betrage nach gleich dem Drehwinkel ist, und $\mathfrak{l}$ der Operator des Bahndrehimpulses.

Wir betrachten zunächst eine Drehung um die z-Achse um den Winkel $d\alpha$. In diesem Fall gilt

$$\psi'(r, \vartheta, \varphi) = \psi(r, \vartheta, \varphi + d\alpha) = \psi(r, \vartheta, \varphi) + \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} d\alpha. \tag{2}$$

Vergleicht man (2) mit (1), so findet man

$$l_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Um den Operator l_x in Kugelkoordinaten zu erhalten, führen wir eine Drehung um die x-Achse aus. Es gilt

$$\begin{aligned} \psi'(r, \vartheta, \varphi) &= \psi(r, \vartheta + d\vartheta, \varphi + d\varphi) \\ &= \left\{1 + \left(\frac{d\vartheta}{d\alpha}\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{d\varphi}{d\alpha}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right) d\alpha\right\} \psi(r, \vartheta, \varphi), \end{aligned}$$

woraus folgt

$$l_x = -i \left(\frac{d\vartheta}{d\alpha}\frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{d\varphi}{d\alpha}\frac{\partial}{\partial \varphi}\right).$$

Wir berechnen $\frac{d\vartheta}{d\alpha}$ und $\frac{d\varphi}{d\alpha}$. Wie man leicht sieht, gilt

$$z' - z = -y\, d\alpha,$$

$$y' - y = z\, d\alpha,$$

und wegen $z' = r\cos\vartheta$, $y' = r\sin\vartheta\sin\varphi$ hat man

$$\frac{d\vartheta}{d\alpha} = -\sin\varphi, \quad \frac{d\varphi}{d\alpha} = -\cot\vartheta\cos\varphi;$$

folglich ist

$$l_x = i\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

Analog findet man

$$l_y = -i\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

4.5. Es ergibt sich

$$l_{z'} = l_x\cos(xz') + l_y\cos(yz') + l_z\cos(zz').$$

4.7. Die Eigenfunktionen sind die Kugelfunktionen $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$. Dabei sind ϑ und φ die Winkelkomponenten des Impulsvektors bezüglich derselben Achsen wie in der Ortsdarstellung.

4.8. Die Transformation kann in Matrixform geschrieben werden:

$$\begin{pmatrix} e^{i(\psi+\varphi)}\cos^2\frac{\vartheta}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}}e^{i\varphi}\sin\vartheta & -e^{-i(\psi-\varphi)}\sin^2\frac{\vartheta}{2} \\ \frac{i}{\sqrt{2}}e^{i\psi}\sin\vartheta & \cos\vartheta & \frac{i}{\sqrt{2}}e^{-i\psi}\sin\vartheta \\ -e^{i(\psi-\varphi)}\sin^2\frac{\vartheta}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}}e^{-i\varphi}\sin\vartheta & e^{-i(\psi+\varphi)}\cos^2\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_{11} \\ Y_{10} \\ Y_{1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y'_{11} \\ Y'_{10} \\ Y'_{1,-1} \end{pmatrix}.$$

4.9. Aus dem Resultat der vorigen Aufgabe folgt für $M = 1$

$$w(+1) = \cos^4\frac{\vartheta}{2}, \quad w(0) = \frac{1}{2}\sin^2\vartheta, \quad w(-1) = \sin^4\frac{\vartheta}{2},$$

für $M = 0$

$$w(+1) = \frac{1}{2}\sin^2\vartheta, \quad w(0) = \cos^2\vartheta, \quad w(-1) = \frac{1}{2}\sin^2\vartheta$$

und für $M = -1$

$$w(+1) = \sin^4\frac{\vartheta}{2}, \quad w(0) = \frac{1}{2}\sin^2\vartheta, \quad w(-1) = \cos^4\frac{\vartheta}{2}.$$

4.10. Man hat

$$w\left(+\frac{1}{2}\right) = \cos^2\frac{\vartheta}{2}, \quad w\left(-\frac{1}{2}\right) = \sin^2\frac{\vartheta}{2}.$$

Der Mittelwert der Spinkomponente ist gleich $^1/_2 \cos\vartheta$.

4.11. Wir benutzen die Transformationsmatrix für die Komponenten der Spinfunktion bei einer Drehung der Koordinatenachsen. Die Matrix lautet

$$\begin{bmatrix} e^{\frac{1}{2}i(\varphi+\psi)}\cos\frac{\vartheta}{2} & i\,e^{\frac{1}{2}i(\varphi-\psi)}\sin\frac{\vartheta}{2} \\ i\,e^{-\frac{1}{2}i(\varphi-\psi)}\sin\frac{\vartheta}{2} & e^{-\frac{1}{2}i(\varphi+\psi)}\cos\frac{\vartheta}{2} \end{bmatrix}.$$

Mit Hilfe dieser Matrix finden wir die Spinfunktion im neuen Koordinatensystem:

$$\psi_1' = e^{\frac{1}{2}i(\varphi+\psi)+i\alpha}\cos\frac{\vartheta}{2}\cos\delta + i\,e^{\frac{1}{2}i(\varphi-\psi)+i\beta}\sin\frac{\vartheta}{2}\sin\delta,$$

$$\psi_2' = i\,e^{-\frac{1}{2}i(\varphi-\psi)+i\alpha}\sin\frac{\vartheta}{2}\cos\delta + e^{-\frac{1}{2}i(\varphi+\psi)+i\beta}\cos\frac{\vartheta}{2}\sin\delta.$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der Spin die Richtung der z'-Achse besitzt, ist

$$w_1 = \psi_1'^*\psi_1' = \cos^2\frac{\vartheta}{2}\cos^2\delta + \sin^2\frac{\vartheta}{2}\sin^2\delta$$

$$+ \frac{1}{2}\sin\vartheta\sin 2\delta\sin(\psi+\alpha-\beta).$$

Aus dieser Formel ergibt sich, daß die Wahrscheinlichkeit für einen Wert der Spinkomponente in einer beliebigen Richtung nur von der Differenz $\alpha-\beta$ und nicht von α und β einzeln abhängt.

4.12. Die Spinrichtung wird durch die Winkel

$$\Theta = 2\delta, \quad \Phi = \frac{\pi}{2} + \beta - \alpha$$

bestimmt.

4.13. Dies ist möglich. Im Falle der gemischten Gesamtheit wird stets unabhängig von der Richtung des inhomogenen Magnetfeldes eine Auf-

spaltung in zwei Bündel vorhanden sein. Im Falle einer reinen Gesamtheit kann man durch eine geeignet gewählte Orientierung des Gerätes erreichen, daß ein Bündel verschwindet.

4.17. Bei einer infinitesimalen Drehung um die x-Achse um den Winkel $d\alpha$ ändern sich die Komponenten der Spinfunktion gemäß

$$(1 + i\,d\alpha\, s_x)\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_0\\ \psi_{-1}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\psi_1'\\ \psi_0'\\ \psi_{-1}'\end{pmatrix}, \tag{1}$$

worin

$$s_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

ist. Der Ausdruck (1) ist den drei Differentialgleichungen

$$\frac{d\psi_1}{d\alpha} = \frac{i}{\sqrt{2}}\psi_0,$$

$$\frac{d\psi_0}{d\alpha} = \frac{i}{2}(\psi_1 + \psi_{-1}),$$

$$\frac{d\psi_{-1}}{d\alpha} = \frac{i}{2}\,\psi_0$$

äquivalent, aus deren Lösungen sich leicht die Transformationsmatrix bestimmen läßt:

$$\begin{vmatrix} \cos^2\frac{\alpha}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}}\sin\alpha & -\sin^2\frac{\alpha}{2} \\ \frac{i}{\sqrt{2}}\sin\alpha & \cos\alpha & \frac{i}{\sqrt{2}}\sin\alpha \\ -\sin^2\frac{\alpha}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}}\sin\alpha & \cos^2\frac{\alpha}{2} \end{vmatrix}.$$

Analog ergibt sich die Transformationsmatrix für eine Drehung um den Winkel α um die z-Achse:

$$\begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & e^{-i\alpha}\end{pmatrix}.$$

Wir charakterisieren die Drehung durch die EULERschen Winkel ψ, ϑ, φ. Die gesuchte Transformationsmatrix ergibt sich durch Multiplikation von drei Matrizen. Man erhält

$$\begin{pmatrix} e^{i(\psi+\varphi)}\cos^2\frac{\vartheta}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}}e^{i\varphi}\sin\vartheta & -e^{-i(\psi-\varphi)}\sin^2\frac{\vartheta}{2} \\ \frac{i}{\sqrt{2}}e^{i\psi}\sin\vartheta & \cos\vartheta & \frac{i}{\sqrt{2}}e^{-i\psi}\sin\vartheta \\ -e^{i(\psi-\varphi)}\sin^2\frac{\vartheta}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}}e^{-i\varphi}\sin\vartheta & e^{-i(\psi+\varphi)}\cos^2\frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Man erhält dasselbe Ergebnis, wenn man die Transformation eines symmetrischen Spinors zweiten Ranges betrachtet. Zwischen den Komponenten der Spinfunktion und den Komponenten des symmetrischen Spinors besteht der Zusammenhang

$$\psi^{11} = \psi_1, \quad \psi^{12} = \psi^{21} = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_0, \quad \psi^{22} = \psi_{-1}. \tag{3}$$

Ein Spinor zweiten Ranges transformiert sich wie das Produkt zweier Spinoren ersten Ranges:

$$\begin{aligned} \psi'^{11} &= \alpha^2\psi^{11} + 2\alpha\beta\psi^{12} + \beta^2\psi^{22}, \\ \psi'^{12} &= \alpha\gamma\psi^{11} + (\alpha\delta + \beta\gamma)\,\psi^{12} + \beta\delta\psi^{22}, \\ \psi'^{22} &= \gamma^2\psi^{11} + 2\gamma\delta\psi^{12} + \delta^2\psi^{22}. \end{aligned}$$

Drückt man die Spinorkomponenten mit Hilfe von (3) durch die Komponenten der Spinfunktion aus, so folgt

$$\begin{aligned} \psi_1' &= \alpha^2\psi_1 + \sqrt{2}\alpha\beta\psi_0 + \beta^2\psi_{-1}, \\ \psi_0' &= \sqrt{2}\alpha\gamma\psi_1 + (\alpha\delta + \beta\gamma)\,\psi_0 + \sqrt{2}\beta\delta\psi_{-1}, \\ \psi_{-1}' &= \gamma^2\psi_1 + \sqrt{2}\gamma\delta\psi_0 + \delta^2\psi_{-1}. \end{aligned}$$

Setzt man in diese Beziehungen die Werte der Koeffizienten ein:

$$\alpha = e^{\frac{1}{2}i(\varphi+\psi)}\cos\frac{\vartheta}{2}, \qquad \beta = i\sin\frac{\vartheta}{2}\,e^{\frac{1}{2}i(\varphi-\psi)},$$

$$\gamma = i\sin\frac{\vartheta}{2}\,e^{-\frac{1}{2}i(\varphi-\psi)}, \quad \delta = e^{-\frac{1}{2}i(\varphi+\psi)}\cos\frac{\vartheta}{2},$$

so erhält man den Ausdruck (2).

4.18. Zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeit denken wir uns das Teilchen mit dem Drehimpuls j formal durch ein aus $2j$ Teilchen mit den Spins $\frac{1}{2}$ bestehendes System ersetzt. Da die z-Komponente des Drehimpulses des Teilchens nach Voraussetzung gleich j ist, sind die z-Komponenten der Spins für alle $2j$ Teilchen des äquivalenten Systems gleich $+\frac{1}{2}$. Die Wahrscheinlichkeit für den Wert $+\frac{1}{2}$ (oder $-\frac{1}{2}$) der z'-Komponente des Spins beträgt für jedes dieser Teilchen $\cos^2 \vartheta/2$ (oder $\sin^2 \vartheta/2$) (vgl. Aufgabe 4.10.). Damit die z'-Komponente des Gesamtdrehimpulses dieser Teilchen gleich m ist, müssen die z'-Komponenten für $j + m$ Teilchen gleich $+\frac{1}{2}$ und für die restlichen $j - m$ Teilchen gleich $-\frac{1}{2}$ sein. Wir erhalten die gesuchte Wahrscheinlichkeit $w(m)$, indem wir

$$\left(\cos^2 \frac{\vartheta}{2}\right)^{j+m} \left(\sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right)^{j-m}$$

mit der Anzahl

$$\frac{(2j)!}{(j+m)!\,(j-m)!}$$

der möglichen Zerlegungen von $2j$ Teilchen in zwei derartige Gruppen multiplizieren:

$$w(m) = \frac{(2j)!}{(j+m)!\,(j-m)!} \left(\cos^2 \frac{\vartheta}{2}\right)^{j+m} \left(\sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right)^{j-m}.$$

Man überzeugt sich leicht von der Gültigkeit der Gleichung

$$\sum_{-j}^{+j} w(m) = 1.$$

4.19. Wir beschreiben den Zustand eines Systems mit der Drehimpulsquantenzahl J durch einen symmetrischen Spinor vom Rang $2J$. Zur Lösung der gestellten Aufgabe ist es erforderlich, den Zusammenhang zwischen den Komponenten

$$\psi^{\overbrace{11\ldots1}^{J+M}\,\overbrace{22\ldots2}^{J-M}}, \quad \psi'^{\overbrace{11\ldots1}^{J+M'}\,\overbrace{22\ldots2}^{J-M'}}$$

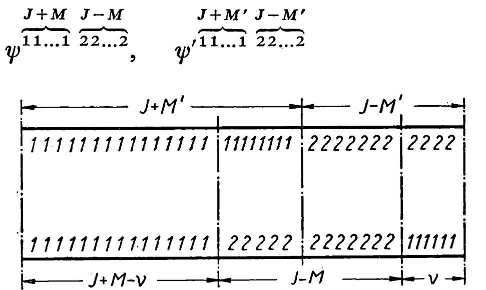


Abb. 23

zu finden. Mit Hilfe der Abb. 23 findet man

$$\psi'^{\overbrace{11\ldots1}^{J+M'}\overbrace{22\ldots2}^{J-M'}} = \frac{(J+M')!\,(J-M')!}{(2J)!}$$

$$\times \sum_{\nu=0} (2J)!\,\frac{(\gamma)^{\nu}\,(\beta)^{M'-M+\nu}\,(\alpha)^{J+M-\nu}\,(\delta)^{J-M'-\nu}}{\nu!\,(M'-M+\nu)!\,(J+M-\nu)!\,(J-M'-\nu)!}$$

$$\times\ \psi^{\overbrace{11\ldots1}^{J+M}\overbrace{22\ldots2}^{J-M}},$$

wobei α, β, γ, δ die CAYLEY-KLEINschen Parameter sind.

Wegen

$$\psi^{\overbrace{11\ldots1}^{J+M}\overbrace{22\ldots2}^{J-M}} = \sqrt{\frac{(J+M)!\,(J-M)!}{(2J)!}}\,\psi(M),$$

$$\psi'^{\overbrace{11\ldots1}^{J+M'}\overbrace{22\ldots2}^{J-M'}} = \sqrt{\frac{(J+M')!\,(J-M')!}{(2J)!}}\,\psi'(M')$$

und $\psi(M) = 1$ (nach Voraussetzung) gilt

$$\psi'(M') = \sqrt{(J+M')!\,(J-M')!\,(J+M)!\,(J-M)!}$$

$$\times \sum_{\nu=0} \frac{(\gamma)^{\nu}\,(\beta)^{M'-M+\nu}\,(\alpha)^{J+M-\nu}\,(\delta)^{J-M'-\nu}}{\nu!\,(M'-M+\nu)!\,(J+M-\nu)!\,(J-M'-\nu)!}.$$

Daraus folgt

$$P(M, M') = (J+M')!\,(J-M')!\,(J+M)!\,(J-M)!\left(\cos\frac{\vartheta}{2}\right)^{4J}$$

$$\times \left\{\sum_{\nu=0} \frac{(-1)^{\nu}\left[\tan\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\right]^{2\nu-M+M'}}{\nu!\,(M'-M+\nu)!\,(J+M-\nu)!\,(J-M'-\nu)!}\right\}^{2}.$$

Unter dem Summenzeichen sind die Kehrwerte der Fakultäten negativer Zahlen stets Null zu setzen. Mit anderen Worten, die Summe erstreckt sich nur auf solche Werte ν, die den Ungleichungen

$$\nu \geqq M - M', \quad \nu \leqq J + M, \quad \nu \leqq J - M'$$

genügen.

4.21. Wir bestimmen zunächst die Eigenfunktionen des Operators j_z. Dazu schreiben wir den Operator in Matrixform:

$$j_z = \begin{pmatrix} l_z + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & l_z - \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Wegen

$$l_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

lautet die Gleichung, welche die Eigenwerte und die Eigenfunktionen von j_z bestimmt,

$$\begin{pmatrix} -i\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -i\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = m\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$$

oder

$$-i\frac{\partial\psi_1}{\partial\varphi}+\frac{1}{2}\psi_1 = m\psi_1,$$

$$-i\frac{\partial\psi_2}{\partial\varphi}-\frac{1}{2}\psi_2 = m\psi_2.$$

Daraus folgt

$$\psi_1 = f_1(r,\vartheta)\exp\left[i(m-\tfrac{1}{2})\varphi\right],\quad \psi_2 = f_2(r,\vartheta)\exp\left[i(m+\tfrac{1}{2})\varphi\right],$$

wobei f_1 und f_2 willkürliche Funktionen von r und ϑ sind und m halbzahlig ist.

Unter allen möglichen Funktionen der Form

$$\begin{pmatrix} f_1(r,\vartheta)\exp\left[i(m-\frac{1}{2})\varphi\right] \\ f_2(r,\vartheta)\exp\left[i(m+\frac{1}{2})\varphi\right]\end{pmatrix}$$

müssen wir diejenigen auswählen, die gleichzeitig Eigenfunktionen des Operators $\mathfrak{l}^2$ sind. Als Eigenfunktionen kommen in Frage

$$\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1(r)\,Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\vartheta,\varphi)\\ R_2(r)\,Y_{l,m+\frac{1}{2}}(\vartheta,\varphi)\end{pmatrix}.$$

Der letzte Schritt besteht darin, daß die angegebene Funktion durch geeignete Wahl von R_1 und R_2 zur Eigenfunktion des Operators des Gesamtdrehimpulsquadrates gemacht wird. Dazu schreiben wir die Gleichung

$$\mathfrak{j}^2\psi = j(j+1)\,\psi$$

in Matrixform:

$$\begin{pmatrix} \mathfrak{l}^2 + \frac{3}{4} + l_z & l_x - il_y \\ l_x + il_y & \mathfrak{l}^2 + \frac{3}{4} - l_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1(r)\, Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \\ R_2(r)\, Y_{l,m+\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}$$

$$= j(j+1) \begin{pmatrix} R_1(r)\, Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \\ R_2(r)\, Y_{l,m+\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}.$$

Beachtet man die Eigenschaft der Kugelfunktionen

$$(l_x + il_y)\, Y_{lm} = \sqrt{(l + m + 1)(l - m)}\, Y_{l,m+1},$$

$$(l_x - il_y)\, Y_{lm} = \sqrt{(l - m + 1)(l + m)}\, Y_{l,m-1},$$

so folgt aus der angegebenen Matrixgleichung, daß R_1 und R_2 zwei homogenen Gleichungen genügen müssen:

$$[l(l+1) - j(j+1) + m + \tfrac{1}{4}]\, R_1 + \sqrt{(l + \tfrac{1}{2})^2 - m^2}\, R_2 = 0,$$

$$\sqrt{(l + \tfrac{1}{2})^2 - m^2}\, R_1 + [l(l+1) - j(j+1) - m + \tfrac{1}{4}]\, R_2 = 0.$$

Diese Gleichungen sind nur dann miteinander vereinbar, wenn j gleich $l + \frac{1}{2}$ oder gleich $l - \frac{1}{2}$ ist. Für $j = l + \frac{1}{2}$ findet man

$$R_1 = \sqrt{l + \tfrac{1}{2} + m}\, R(r), \quad R_2 = \sqrt{l - m + \tfrac{1}{2}}\, R(r).$$

Daher gilt

$$\psi(l, j = l + \tfrac{1}{2}, m) = R(r) \begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}\, Y_{l,m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\dfrac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}\, Y_{l,m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \quad (l = 0, 1, 2, \ldots).$$

Analog ergibt sich

$$\psi(l, j = l - \tfrac{1}{2}, m) = R(r) \begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}\, Y_{l,m-\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{\dfrac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}}\, Y_{l,m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix},$$

$$(l = 0, 1, 2, \ldots).$$

Der Faktor $1/\sqrt{2l + 1}$ tritt aus Normierungsgründen auf.

4.22.

z-Komponente		Wahrscheinlichkeit	
		$j=l+\frac{1}{2}$	$j=l-\frac{1}{2}$
Bahndrehimpuls Spin	$m-\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$	$\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}$	$\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}$
Bahndrehimpuls Spin	$m+\frac{1}{2}$ $-\frac{1}{2}$	$\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}$	$\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}$

$$\bar{l}_z\left(j=l+\frac{1}{2}\right)=\frac{2m\,l}{2l+1},\quad \bar{s}_z\left(j=l+\frac{1}{2}\right)=\frac{m}{2l+1},$$

$$\bar{l}_z\left(j=l-\frac{1}{2}\right)=\frac{2m(l+1)}{2l+1},\quad \bar{s}_z\left(j=l-\frac{1}{2}\right)=-\frac{m}{2l+1}.$$

4.23. Die Eigenfunktionen des Operators der Spinkomponente in Richtung Θ, Φ ergeben sich aus der Beziehung

$$(\sigma_x \sin\Theta\cos\Phi+\sigma_y\sin\Theta\sin\Phi+\sigma_z\cos\Theta)\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix};$$

man erhält

$$\alpha\sin\Theta\,\mathrm{e}^{i\Phi}-\beta\cos\Theta=\beta. \tag{1}$$

Aus (1) finden wir das Verhältnis α/β:

$$\frac{\alpha}{\beta}=\cot\frac{\Theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\Phi}. \tag{2}$$

Andererseits ergibt sich mit Hilfe der expliziten Form der Funktionen $\psi(l,j=l+\frac{1}{2},m)$ und $\psi(l,j=l-\frac{1}{2},m)$

$$\frac{\alpha}{\beta}=c_j\frac{Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\vartheta,\varphi)}{Y_{l,m+\frac{1}{2}}(\vartheta,\varphi)}=c_j\frac{P_l^{m-\frac{1}{2}}(\cos\vartheta)}{P_l^{m+\frac{1}{2}}(\cos\vartheta)}\mathrm{e}^{-i\varphi} \tag{3}$$

mit

$$c_j=\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l-m+\frac{1}{2}}}\quad \text{für}\quad j=l+\frac{1}{2},$$

$$c_j=-\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{1}{2}}}\quad \text{für}\quad j=l-\frac{1}{2}.$$

Durch Gleichsetzen von (2) und (3) finden wir $\Phi=\varphi$, d. h., die Spinrichtung in einem vorgegebenen Raumpunkt liegt in der Ebene, die durch den vor-

gegebenen Punkt und die z-Achse hindurchgeht. Der Winkel Θ ergibt sich aus der Bedingung

$$\cot\frac{\Theta}{2} = c_j \frac{P_l^{m-\frac{1}{2}}(\cos\vartheta)}{P_l^{m+\frac{1}{2}}(\cos\vartheta)}.$$

4.24. Der Operator des Quadrates des Gesamtspins ist

$$\begin{aligned}\mathfrak{S}^2 &= \mathfrak{s}_1^2 + \mathfrak{s}_2^2 + 2\mathfrak{s}_1\mathfrak{s}_2 \\ &= \frac{3}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}_2 + \frac{1}{2}\left\{\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}_2\right. \\ &\quad \left. + \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}_2\right\},\end{aligned}$$

wobei die Indizes auf die Nummer des Teilchens hinweisen.

Wir bestimmen die Eigenfunktionen dieses Operators zunächst für den Fall, daß die z-Komponente des Gesamtspins gleich Null ist:

$$\mathfrak{S}^2\left\{a\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 + b\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right\} = \lambda\left\{a\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 + b\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right\}.$$

Daraus folgt

$$(\lambda - 1)\,a - b = 0, \quad -a + (\lambda - 1)\,b = 0.$$

Für λ haben wir die beiden Werte $\lambda = 2$ und $\lambda = 0$.

Für $\lambda = 2$ gilt $a = b$, für $\lambda = 0$ folgt $a = -b$. Mit der Normierungsbedingung $a^2 + b^2 = 1$ erhalten wir die Eigenfunktionen in der Form

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right\}, \quad \lambda = 2 \quad (S = 1),$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right\}, \quad \lambda = 0 \quad (S = 0).$$

Man überzeugt sich leicht davon, daß die Funktionen

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2 \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2$$

ebenfalls Eigenfunktionen des Operators $\mathfrak{S}^2$ sind, wobei der Eigenwert der z-Komponente des Spins im ersten Fall gleich 1 und im zweiten Fall gleich -1 ist. Die erhaltenen Funktionen sind ferner Eigenfunktionen des Operators $\mathfrak{s}_1\mathfrak{s}_2$.

4.25. Die Wellenfunktion $\psi(J, M)$ des Systems besteht aus einer Summe von Produkten der Wellenfunktionen der einzelnen Teilchen:

$$\Psi(J, M) = c_1 \psi_1^{(1)} \psi_{M-1}^{(2)} + c_0 \psi_0^{(1)} \psi_M^{(2)} + c_{-1} \psi_{-1}^{(1)} \psi_{M+1}^{(2)}.$$

Dabei kennzeichnen die unteren Indizes an den Wellenfunktionen die Werte der z-Komponenten der Einzeldrehimpulse.

Die Koeffizienten c_i lassen sich aus der Bedingung

$$\mathfrak{J}^2 \Psi(J, M) = J(J+1)\, \Psi(J, M) \tag{1}$$

bestimmen. Wir schreiben die Wellenfunktionen des ersten Teilchens am besten in der Form

$$\psi_1^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_0^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{-1}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

In dieser Schreibweise der Wellenfunktionen haben wir für den Operator $\mathfrak{l}_1$ die dreireihigen Matrizen

$$l_{1x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad l_{1y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad l_{1z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

für den Operator $\mathfrak{J}^2$ erhalten wir

$$\mathfrak{J}^2 = \mathfrak{l}_1^2 + \mathfrak{l}_2^2 + 2\mathfrak{l}_1\, \mathfrak{l}_2$$
$$= \begin{pmatrix} l(l+1) + 2 + 2l_{2z} & \sqrt{2}\, l_{2-} & 0 \\ \sqrt{2}\, l_{2+} & l(l+1) + 2 & \sqrt{2}\, l_{2-} \\ 0 & \sqrt{2}\, l_{2+} & l(l+1) + 2 - 2l_{2z} \end{pmatrix}$$

mit

$$l_+ = l_x + i l_y, \quad l_- = l_x - i l_y.$$

Mit Hilfe der Eigenschaften der Operatoren l_+ und l_-

$$l_+ \psi_m = \sqrt{(l + m + 1)(l - m)}\, \psi_{m+1},$$
$$l_- \psi_m = \sqrt{(l + m)(l - m + 1)}\, \psi_{m-1}$$

ergeben sich aus der Bedingung (1) zwei Gleichungen:

$$[J(J+1) - l(l+1) - 2M]\, c_1 = \sqrt{2} \sqrt{(l + M)(l - M + 1)}\, c_0,$$
$$[J(J+1) - l(l+1) + 2M]\, c_{-1} = \sqrt{2} \sqrt{(l + M + 1)(l - M)}\, c_0$$

(die dritte Gleichung ist eine Identität).

Durch Lösung dieser Gleichungen erhalten wir für $c(J, M)$:

$$\begin{pmatrix} c_1(l+1, M) & c_0(l+1, M) & c_{-1}(l+1, M) \\ c_1(l, M) & c_0(l, M) & c_{-1}(l, M) \\ c_1(l-1, M) & c_0(l-1, M) & c_{-1}(l-1, M) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{(l+M)(l+M+1)}{2(2l+1)(l+1)}} & \sqrt{\frac{(l+M+1)(l-M+1)}{(2l+1)(l+1)}} & \sqrt{\frac{(l-M)(l-M+1)}{2(2l+1)(l+1)}} \\ -\sqrt{\frac{(l+M)(l-M+1)}{2l(l+1)}} & \frac{M}{\sqrt{l(l+1)}} & \sqrt{\frac{(l+M+1)(l-M)}{2l(l+1)}} \\ \sqrt{\frac{(l-M)(l-M+1)}{2l(2l+1)}} & -\sqrt{\frac{(l+M)(l-M)}{l(2l+1)}} & \sqrt{\frac{(l+M)(l+M+1)}{2l(2l+1)}} \end{bmatrix}.$$

Wegen der Orthogonalität der Matrix ist die inverse gleich der transponierten Matrix. Daher erhält man jede der Funktionen $\psi_1^{(1)}\psi_{M-1}^{(2)}$, $\psi_0^{(1)}\psi_M^{(2)}$, $\psi_{-1}^{(1)}\psi_{M+1}^{(2)}$ als Linearkombination aus $\Psi(l+1, M)$, $\Psi(l, M)$, $\Psi(l-1, M)$ mit den Koeffizienten, die in den Spalten dieser Matrix stehen.

4.26. Die der Drehimpulsquantenzahl $J = j_1 + j_2$ und der z-Komponente $M = J$ entsprechende Wellenfunktion des Systems besitzt die Form

$$\Psi_{J=j_1+j_2}^{M=J} = \psi_{j_1}^{j_1}(1)\,\psi_{j_2}^{j_2}(2).$$

(Die oberen Indizes bezeichnen die Werte der z-Komponenten der Drehimpulse.)

Durch Anwendung des Operators J_- erhalten wir

$$\begin{aligned} J_-\Psi_{J=j_1+j_2}^{M=J} &= \sqrt{J(J+1) - M(M-1)}\,\Psi_J^{J-1} \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - j_1(j_1-1)}\,\psi_{j_1}^{j_1-1}(1)\,\psi_{j_2}^{j_2}(2) \\ &\quad + \sqrt{j_2(j_2+1) - j_2(j_2-1)}\,\psi_{j_2}^{j_1}(1)\,\psi_{j_2}^{j_2-1}(2). \end{aligned}$$

Schließlich ergibt sich

$$\Psi_J^{J-1} = \frac{1}{\sqrt{j_1 + j_2}}\left\{\sqrt{j_1}\,\psi_{j_1}^{j_1-1}(1)\,\psi_{j_1}^{j_2}(2) + \sqrt{j_2}\,\psi_{j_1}^{j_1}(1)\,\psi_{j_2}^{j_2-1}(2)\right\}.$$

Aus der Bedingung für die Orthonormalität der Funktionen Ψ_J^{J-1} und Ψ_{J-1}^{J-1} finden wir

$$\Psi_{J-1}^{J-1} = \frac{1}{\sqrt{j_1 + j_2}}\left\{\sqrt{j_1}\,\psi_{j_1}^{j_1-1}(1)\,\psi_{j_2}^{j_2}(2) - \sqrt{j_2}\,\psi_{j_1}^{j_1}(1)\,\psi_{j_2}^{j_2-1}(2)\right\}.$$

4.32. Der Operator der magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung besitzt die Form

$$V = \mu^2 r^{-3}\{(\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2) - 3r^{-2}(\vec{\sigma}_1\mathfrak{r})(\vec{\sigma}_2\mathfrak{r})\}.$$

Unter Benutzung des Resultates der Aufgabe 4.26. erhalten wir

$$\psi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right\},$$

$$E_{00} = 0$$

für den Singulettzustand und

$$\psi_1^1 = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 \quad \text{bzw.} \quad \psi_1^{-1} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2,$$

$$E_{1,1} = E_{1,-1} = -2\mu^2 a^{-3},$$

$$\psi_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right\}, \quad E_{1,0} = 4\mu^2 a^{-3}$$

für den Triplettzustand. Dabei ist μ das magnetische Moment des Protons, und die z-Achse liegt in der Verbindungsgeraden zwischen den Protonen.

4.33. Es ergibt sich

$$\tau = \frac{\pi\hbar}{4\mu^2}a^3.$$

4.35. Man findet

$$\bar{\mu}_x = \bar{\mu}_y = 0,$$

$$\bar{\mu}_z = M_J\left\{\frac{1}{2}(g_1 + g_2) + \frac{1}{2}(g_1 - g_2)\frac{J_1(J_1+1) - J_2(J_2+1)}{J(J+1)}\right\}.$$

4.36. $-0{,}24$.

4.37. $-1{,}91$.

4.38.

4.38.1. 0,879. *4.38.2.* 0,5. *4.38.3.* 0,689. *4.38.4.* 0,310.

4.39. Das Gewicht der D-Welle ist gleich 0,04.

4.40.

4.40.1. $-\overline{r^2}/10$. *4.40.2.* $\overline{r^2}/20$.

Man beachte das unterschiedliche Vorzeichen des Quadrupolmoments in den Zuständen $^1P_1$ und $^3P_1$.

4.41. Das Quadrupolmoment ist definiert durch den Ausdruck

$$Q_0 = Q_j^{m_j=j} = \int (3\cos^2\vartheta - 1)\, r^2 |\Psi_j^{m_j=j}|^2\, d\tau.$$

Im Falle $j = l + \frac{1}{2}$ haben wir die Wellenfunktion

$$\Psi_{j=l+\frac{1}{2}}^{m_j=j} = R(r)\, Y_l^l(\vartheta, \varphi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

und im Falle $j = l - \frac{1}{2}$

$$\Psi_{j=l-\frac{1}{2}}^{m_j=j} = R(r) \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} Y_l^{l-1}(\vartheta, \varphi) \\ -\sqrt{2l}\, Y_l^l(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}.$$

Wir erhalten den Mittelwert

$$Q_0 = -\overline{r^2}\, \frac{2j-1}{2j+2}.$$

Das Quadrupolmoment hängt nur von j und nicht von l ab. Ist die magnetische Quantenzahl $m_j \neq j$, so folgt

$$Q_j^{mj} = Q_0 \frac{3m_j^2 - j(j+1)}{j(2j-1)}.$$

4.42. Zur Bestimmung des Quadrupolmoments haben wir den Mittelwert des Operators

$$Q = \frac{3Q_0}{j(2j-1)} \left\{ j_{1z}^2 + j_{2z}^2 + j_{3z}^2 - j(j+1) \right\}$$

zu bilden. Dabei sind j_{1z}, j_{2z}, j_{3z} die Operatoren der z-Komponenten der Drehimpulse des ersten, zweiten und dritten Teilchens, und Q ist das durch die einzelnen Protonen erzeugte Quadrupolmoment.

Die Wellenfunktion wurde in der Aufgabe 4.28. bestimmt. Durch Mittelwertbildung erhalten wir

$$\overline{Q} = \frac{3Q_0}{j(2j-1)} \left\{ -j(j+1) + j^2 + \frac{2}{2j-1}\, 2 \sum_{1/2}^{j-1} m_j^2 \right\}.$$

Wegen

$$\sum_{1/2}^{j-1} m_j^2 = \frac{j(2j-1)(j-1)}{6}$$

finden wir schließlich

$$\bar{Q} = Q_0 \left\{1 - \frac{4}{2j-1}\right\}.$$

4.43. Wir wählen ein Koordinatensystem, in dem die gemischten Ableitungen des elektrostatischen Potentials am Ort des Kerns verschwinden:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x\, \partial y} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y\, \partial z} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z\, \partial x} = 0.$$

Diese Wahl ist durch eine geeignete Drehung der Koordinatenachsen immer möglich.

In einem solchen Koordinatensystem besitzt der Operator der Quadrupolenergie H die Form

$$H = \frac{Q_0}{2I(2I-1)} \left\{\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} I_x^2 + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} I_y^2 + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} I_z^2\right\}.$$

(Die gleiche Form ergibt sich für den HAMILTON-Operator eines unsymmetrischen Kreisels, vgl. Aufgabe 8.21.)

Man kann den Operator H in einer für die Berechnung der Matrixelemente zweckmäßigeren Form schreiben, indem man statt I_x und I_y die Operatoren

$$I_+ = I_x + iI_y, \quad I_- = I_x - iI_y$$

einführt. Drückt man I_x und I_y durch I_+ und I_- aus, so erhält man

$$H = \frac{Q_0}{2I(2I-1)} \left\{\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} (3I_z^2 - \mathfrak{I}^2) + \frac{1}{4}\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}\right)(I_+^2 + I_-^2)\right\}.$$

Die von Null verschiedenen Matrixelemente von H besitzen die Form

$$(m\,|H|\,m) = \frac{A}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} [3m^2 - I(I+1)],$$

$$(m\,|H|\, m \pm 2) = \frac{A}{4}\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}\right) [(I \mp m)(I \mp m - 1) \times (I \pm m + 1)(I \pm m + 2)]^{1/2}.$$

Dabei ist

$$A = \frac{Q_0}{2I(2I-1)}.$$

Zur Bestimmung der Energie ist die Säkulargleichung vom Grade $2I + 1$ zu lösen. Da die Matrixelemente nur für Übergänge zwischen Zuständen mit derselben Parität von m von Null verschieden sind, zerfällt die Säkulargleichung in zwei Gleichungen.

Ist I ganzzahlig, so ist eine Gleichung vom Grade I und die andere vom Grade $I + 1$. Falls I halbzahlig ist, sind beide Gleichungen identisch und vom Grade $I + {}^1/_2$. Die Lösung der Säkulargleichung ergibt

$$I = 1: \quad E_1 = -\frac{Q_0}{2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}; \quad E_2 = -\frac{Q_0}{2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}; \quad E_3 = -\frac{Q_0}{2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2};$$

$$I = \frac{3}{2}: \quad E_{1,2} = \frac{Q_0}{\sqrt{12}}\left\{\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\right)^2 + \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}\right)^2 + \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\right)\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}\right)\right\}^{1/2};$$

$$E_{3,4} = -\frac{Q_0}{\sqrt{2}}\left\{\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\right)^2 + \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}\right)^2 + \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\right)\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}\right)\right\}^{1/2};$$

$$I = 2: \quad E_1 = \frac{Q_0}{4}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\right); \quad E_2 = \frac{Q_0}{4}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}\right); \quad E_3 = \frac{Q_0}{4}\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}\right);$$

$$E_{4,5} = \pm\frac{Q_0}{2\sqrt{3}}\left\{\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\right)^2 + \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}\right)^2 + \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}\right)\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}\right)\right\}^{1/2}.$$

4.48. Der Zustand mit definierter Drehimpulsquantenzahl J ($\mathfrak{J}^2$ ist eine Konstante der Bewegung) kann aus den Zuständen mit $L = J - \frac{1}{2}$ und $L = J + \frac{1}{2}$ konstruiert werden. Die Spiegelung ($x \to -x$, $y \to -y$, $z \to -z$) läßt den HAMILTON-Operator des abgeschlossenen Systems ungeändert (die Parität ist eine Konstante der Bewegung). Die Paritäten der Zustände mit $L = J - \frac{1}{2}$ und $L = J + \frac{1}{2}$ sind voneinander verschieden. Daraus folgt, daß die Bahndrehimpulsquantenzahl L der Relativbewegung der Teilchen in einem Zustand mit vorgegebenem J einen definierten Wert besitzt.

4.49. Die Spins des α-Teilchens und des Kernes B sind gleich Null. Daher ist der Bahndrehimpuls L der Relativbewegung des aus α-Teilchen und Endkern bestehenden Systems gleich 1. Folglich wird sich dieses System in einem ungeraden Zustand befinden (der Zustand des α-Teilchens ist gerade), während derjenige des Anfangskerns gerade war.

4.51. Der Zerfall ist nicht möglich.

4.53. $J = 0,\ J = 2$.

Die Wellenfunktionen für $J = 1$ und $J = 3$ sind bezüglich der Teilchenvariablen symmetrisch. Daher können Zustände mit solchen J nicht realisiert werden.

5. ZENTRALFELD

5.1. Mit $R_{nl} = \frac{\chi_{nl}}{r}$ folgt aus der Gleichung für R_{nl}

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\chi_{nl}'' - \left(E_{nl} - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu\, r^2}\right)\chi_{nl} = 0.$$

Diese Gleichung stimmt formal mit der SCHRÖDINGER-Gleichung der eindimensionalen Bewegung im Gebiet $0 \leqq r < \infty$ mit dem effektiven Potential

$$U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu\, r^2}$$

überein. Da $\chi_{nl} = rR_{nl}$ für $r = 0$ verschwindet, kann man annehmen, daß bei diesem eindimensionalen Problem $U = +\infty$ für $r < 0$ gilt.

5.2. In die Gleichung für $\chi = Rr$,

$$\chi'' + \left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\chi = 0,$$

setzen wir

$$\chi = A \exp\left(i\frac{S}{\hbar}\right)$$

ein, wobei A und S reelle Funktionen sind.

Setzen wir sowohl Real- als auch Imaginärteil der Gleichung gleich Null, so erhalten wir

$$2A'S' + S''A = 0, \tag{1}$$

$$S'^2 - \frac{\hbar^2 A''}{A} = 2\mu[E - U(r)] - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2}. \tag{2}$$

Aus der ersten Gleichung folgt

$$A = \frac{\text{const}}{\sqrt{S'}}.$$

Die zweite Gleichung lösen wir näherungsweise, indem wir $\hbar^2$ als kleine Größe ansehen. Dabei ist jedoch darauf zu achten, daß die Größe $\hbar l$, die in der klassischen Mechanik den Drehimpuls darstellt, beim Übergang zur klassischen Mechanik ($\hbar \to 0$) als endlich betrachtet werden muß. In der Gl. (2) kann also nur der Term $\hbar^2 A''/A$ als kleine Größe aufgefaßt werden. Für kleine r [in diesem Fall dominiert auf der rechten Seite von (2) der Term $\hbar^2 l(l+1)/r^2$] wird

$$S' \approx i\hbar \frac{\sqrt{l(l+1)}}{r}, \quad A \sim \sqrt{r},$$

woraus wir näherungsweise

$$\hbar^2 \frac{A''}{A} \approx -\frac{\hbar^2}{4r^2} \tag{3}$$

erhalten. Wir erhalten also eine bessere Näherung für S, wenn wir diesen Term berücksichtigen und den näherungsweise gültigen Ausdruck (3) in (2) einsetzen (für große r ist eine solche Korrektion unwesentlich). Wir finden

$$S = \int \sqrt{2\mu[E - U(r)] - \frac{\hbar^2 (l + \frac{1}{2})^2}{r^2}}\, dr,$$

$$A = \text{const} \left[2\mu[E - U(r)] - \frac{\hbar^2 (l + \frac{1}{2})^2}{r^2} \right]^{-1/4}.$$

5.3. Wir stellen den HAMILTON-Operator in folgender Form dar:

$$H = H_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2},$$

wobei

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu\, r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + U(r)$$

ist.

Dann sind die minimalen Werte der Energie und die zugehörigen Eigenfunktionen durch die Beziehungen

$$E_l^{\min} = \int \psi_l^* \left\{ H_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \psi_l \, d\tau,$$

$$E_{l+1}^{\min} = \int \psi_{l+1}^* \left\{ H_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{(l+1)(l+2)}{r^2} \right\} \psi_{l+1} \, d\tau$$

miteinander verknüpft. Den letzten Ausdruck schreiben wir in der Form

$$E_{l+1}^{\min} = \int \psi_{l+1}^* \left\{ H_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right\} \psi_{l+1}\, d\tau + \int \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{l+1}{r^2} \psi_{l+1}^* \psi_{l+1}\, d\tau.$$

Wir vergleichen den ersten Term dieses Ausdruckes mit $E_l^{\min}$. Da ψ_l zum kleinsten Eigenwert des Operators

$$H_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

gehört, gilt

$$\int \psi_{l+1}^* \left\{ H_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \psi_{l+1}\, d\tau > \int \psi_l^* \left\{ H_0 + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \psi_l\, d\tau.$$

Das Integral

$$\int \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{(l+1)}{r^2} \psi_{l+1}^* \psi_{l+1}\, d\tau$$

ist immer größer als Null. Folglich gilt $E_l^{\min} < E_{l+1}^{\min}$, womit die Behauptung bewiesen ist.

5.4. Man erhält

$$\mathfrak{p}_1 + \mathfrak{p}_2 \equiv \mathfrak{P} = -i\hbar\nabla_R, \qquad \mathfrak{l}_1 + \mathfrak{l}_2 \equiv \mathfrak{L} = \mathfrak{R} \times \mathfrak{P} + \mathfrak{r} \times \mathfrak{p}$$

mit $\mathfrak{p} = -i\hbar\nabla_r$.

5.5. Die potentielle Energie ist

$$U(r) = \frac{1}{2} \mu\omega^2 r^2.$$

Der radiale Anteil R der Wellenfunktion genügt der Gleichung

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \left\{ \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{\mu^2\omega^2 r^2}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0.$$

Mit $\chi = Rr$ und den Bezeichnungen

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu E}, \quad \frac{\mu\omega}{\hbar} = \lambda$$

folgt

$$\chi'' + \left\{ k^2 - \lambda^2 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \chi = 0. \tag{1}$$

Berücksichtigen wir das asymptotische Verhalten von χ für $r \to 0$ und $r \to \infty$, so erhalten wir die Lösung in der Form

$$\chi = r^{l+1} \exp\left(-\frac{\lambda}{2} r^2\right) u(r). \tag{2}$$

Durch Einsetzen von (2) in (1) finden wir eine Gleichung für die Funktion u:

$$u'' + 2\left\{\frac{l+1}{r} - \lambda r\right\} u' - \left\{2\lambda\left(l + \frac{3}{2}\right) - k^2\right\} u = 0. \tag{3}$$

Führen wir die neue unabhängige Variable $\xi = \lambda r^2$ ein, so folgt aus (3) die Differentialgleichung

$$\xi \frac{d^2u}{d\xi^2} + \left\{\left(l + \frac{3}{2}\right) - \xi\right\} \frac{du}{d\xi} + \left\{\frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2}\right) - \frac{1}{2} s\right\} u = 0$$

mit

$$s = \frac{k^2}{2\lambda} = \frac{E}{\hbar\omega}.$$

Lösung dieser Gleichung ist die konfluente hypergeometrische Funktion

$$u = F\left\{\frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - s\right),\ l + \frac{3}{2};\ \xi\right\}.$$

Die Forderung, daß R für $r \to \infty$ abnehmen muß, liefert

$$\frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - s\right) = -n_r \quad (n_r = 0, 1, 2, \ldots).$$

Damit erhalten wir für die Energieniveaus

$$E_{n_r l} = \hbar\omega\left(l + 2n_r + \frac{3}{2}\right)$$

und für die Wellenfunktionen

$$\psi_{n_r lm} = r^l \exp\left(-\frac{\lambda}{2} r^2\right) F\left\{-n_r,\ l + \frac{3}{2};\ \lambda r^2\right\} Y_{lm}(\vartheta, \varphi).$$

5.6. Die Wellenfunktionen lauten

$$\Phi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \varphi_{n_1}(x)\, \varphi_{n_2}(y)\, \varphi_{n_3}(z),$$

wobei

$$\varphi_n(x) = (2^n \lambda^{n-1/2} n!)^{-1/2}\, \pi^{-1/4} \left(\lambda x - \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}\lambda x^2\right)$$

ist. Die zugehörigen Energieniveaus sind

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \hbar\omega\left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)$$

(vgl. Aufgabe 1.6.). Der Zusammenhang zwischen $\psi_{n_r l m}$ und $\Phi_{n_1 n_2 n_3}$ lautet für $n_r = 0,\ l = 1$:

$$\psi_{011} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_{100} + i\Phi_{010}),$$

$$\psi_{010} = \Phi_{001},$$

$$\psi_{01,-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_{100} - i\Phi_{010}).$$

5.7. Man findet

$$Z_n = (n + 1)(n + 2)$$

mit

$$n = 2n_r + l.$$

5.8. Man erhält für $^4_2\mathrm{He}$

$$\varrho(\mathfrak{r}) = \frac{4}{(r_0\sqrt{2\pi})^3}\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right)$$

mit

$$r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\,\omega}}, \quad R = r_0$$

und für $^{16}_{\ 8}\mathrm{O}$

$$\varrho(\mathfrak{r}) = \frac{4}{(r_0\sqrt{2\pi})^3}\left(1 + \frac{r^2}{r_0^2}\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{r^2}{r_0^2}\right),$$

$$R = 3{,}73\, r_0.$$

5.9. Die Gleichung für die radiale Wellenfunktion lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}R + \{U(r) - E\}R = 0,$$

wobei μ die reduzierte Masse ist. Wegen $M_\mathrm{p} \approx M_\mathrm{n} = M$ gilt

$$\mu = \frac{M_\mathrm{p} M_\mathrm{n}}{M_\mathrm{p} + M_\mathrm{n}} \approx \frac{M}{2}.$$

Setzen wir $l = 0$ und $R = \chi(r)/r$, so erhalten wir

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + A\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\right]\chi = 0.$$

Mit der neuen Variablen

$$\xi = \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$$

finden wir

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{d\chi}{d\xi} + \left(c^2 - \frac{k^2}{\xi^2}\right)\chi = 0,$$

wobei

$$c^2 = \frac{8\mu}{k^2}Aa^2, \quad k^2 = -\frac{8\mu}{\hbar^2}Ea^2 > 0$$

ist. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lautet

$$\chi = B_1 J_k(c\xi) + B_2 J_{-k}(c\xi).$$

Für $r \to \infty$ ($\xi \to 0$) muß die Wellenfunktion des stationären Zustandes verschwinden, so daß $B_2 = 0$ und folglich

$$R = \frac{B_1}{r} J_k\left[c\exp\left(-\frac{r}{2a}\right)\right]$$

gilt. Damit R für $r = 0$ endlich ist, haben wir

$$J_k(c) = 0$$

zu fordern. Diese Gleichung liefert den Zusammenhang zwischen a und A. Man erhält die Werte von a und A für den Grundzustand, indem man für c die erste Wurzel der BESSEL-Funktion nimmt (die radiale Wellenfunktion kann keine Knoten besitzen).

$a \cdot 10^{13}$	k	c	A [MeV]
1	0,45	3,1	100
2	0,91	3,7	36
4,4	2,02	5,1	14

5.10. Der Mittelwert der Energie E beträgt in dem durch die Wellenfunktion $\psi(\mathfrak{r})$ beschriebenen Zustand

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu}\int(\nabla\psi)^2\,d\tau + \int U\psi^2\,d\tau.$$

Nach dem Variationsprinzip nimmt E den Wert der Energie des Grundzustandes an, wenn ψ die exakte Funktion des Grundzustandes ist. Setzt man für ψ bestimmte Funktionen ein, die von einem oder mehreren Parametern $\alpha, \beta, \ldots$ abhängen, so wird E eine Funktion $E(\alpha, \beta, \ldots)$ dieser Parameter, und man erhält die besten Näherungen für die Energie und die ψ-Funktion des Grundzustandes für die Werte $\alpha = \alpha_0, \beta = \beta_0, \ldots$, die den Bedingungen

$$\left(\frac{\partial E(\alpha, \beta, \ldots)}{\partial \alpha}\right)_{\substack{\alpha=\alpha_0 \\ \beta=\beta_0 \\ \cdots\cdots}} = 0, \quad \left(\frac{\partial E(\alpha, \beta, \ldots)}{\partial \beta}\right)_{\substack{\alpha=\alpha_0 \\ \beta=\beta_0 \\ \cdots\cdots}} = 0, \ldots$$

genügen. Dabei ist $E(\alpha_0, \beta_0, \ldots)$ stets größer als die Energie des Grundzustandes und nähert sich ihr um so mehr, je zweckmäßiger die Klasse der Vergleichsfunktionen gewählt wird.

In unserem Fall haben wir

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R(r)$$

mit

$$R(r) = c \exp(-\alpha r/2a).$$

Aus der Normierungsbedingung folgt

$$c^2 = \frac{1}{2} (\alpha/a)^3,$$

so daß

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= c^2 \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \left(\frac{\alpha}{2a}\right)^2 \exp\left[-\frac{\alpha r}{a}\right] r^2 \, dr \\ &\quad - c^2 A \int_0^\infty \exp\left[-\frac{\alpha r}{a} - \frac{r}{a}\right] r^2 \, dr \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\alpha}{2a}\right)^2 - A \left(\frac{\alpha}{\alpha + 1}\right)^3 \end{aligned}$$

ist. Das Minimum von $E(\alpha)$ ergibt sich aus

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha}{4\mu a^2} - \frac{3A\alpha^2}{(\alpha + 1)^4} = 0;$$

mithin gilt

$$\frac{(\alpha_0 + 1)^4}{\alpha_0} = \frac{12A\mu a^2}{\hbar^2} = 22{,}3; \quad \alpha_0 = 1{,}34.$$

Für diesen Parameterwert ist die Energie

$$E = -2{,}14\ \text{MeV}.$$

Die exakte Lösung des Problems führt für die gegebenen Werte von a und A auf $E = -2{,}2$ MeV (vgl. die vorige Aufgabe).

5.11. Die radiale Wellenfunktion genügt für $r < a$ der Gleichung

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}R + k^2R = 0, \tag{1}$$

wobei

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

ist. Für $r = a$ ist $R = 0$.

Führen wir die Funktion

$$\chi(r) = \sqrt{r}\,R(r)$$

ein, so erhalten wir aus (1)

$$\chi'' + \frac{1}{r}\chi' + \left\{k^2 - \frac{(l+\frac{1}{2})^2}{r^2}\right\}\chi = 0.$$

Dieser Gleichung genügen die BESSEL-Funktionen mit halbzahligem Index:

$$\chi(r) = J_{l+1/2}(kr),$$

$$R(r) = cr^{-1/2}J_{l+1/2}(kr).$$

Die Energiewerte $E = \hbar^2k^2/2\mu$ der stationären Zustände werden aus der Bedingung bestimmt, daß die BESSEL-Funktionen für $r = a$ verschwinden:

$$J_{l+1/2}(ka) = 0,$$

während c sich aus der Normierungsbedingung ergibt.

Das Energieniveau eines Teilchens mit dem Drehimpuls $l = 0$ läßt sich am einfachsten bestimmen. Es gilt in diesem Fall

$$J_{\frac{1}{2}}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi kr}}\sin kr,$$

und die Energie beträgt

$$E_{n0} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{n^2\pi^2}{a^2}.$$

5.12. Das Problem reduziert sich auf die Lösung des eindimensionalen Problems mit dem Potential

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{für} \quad 0 < r < a, \\ 0 & \text{für} \quad r > a, \\ \infty & \text{für} \quad r < 0. \end{cases}$$

In der Aufgabe 1.4. setzen wir $V_1 \to \infty$, $V_2 = U_0$ und erhalten die Gleichung

$$ka = n\pi - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2m\,U_0}}, \qquad k = \frac{\sqrt{2m\,E}}{\hbar},$$

welche die Energieniveaus des diskreten Spektrums bestimmt. Die Energieniveaus lassen sich leicht mit Hilfe einer graphischen Darstellung finden (Abb. 24). Die Topftiefe, bei der das erste diskrete Niveau erscheint, beträgt

$$U_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m\,a^2}.$$

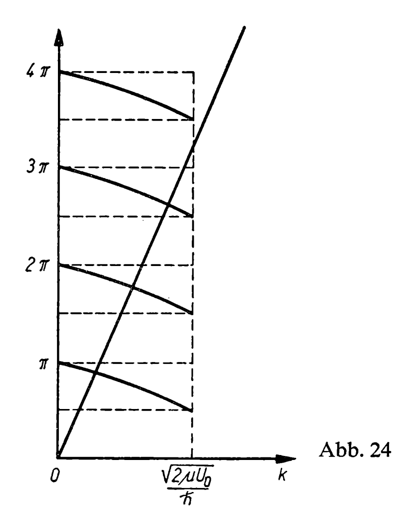


Abb. 24

5.13. Sind die Kanten des Topfes abgerundet, so werden alle Energieniveaus nach oben verschoben ($\Delta E > 0$). Die zu Zuständen mit großem l gehörigen Niveaus werden am stärksten verschoben, da sich ein Teilchen, das sich in Zuständen mit großem l befindet, verhältnismäßig lange am Rande des Topfes aufhält.

5.14. Die radiale Wellenfunktion genügt der Gleichung

$$\chi'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - U)\chi = 0.$$

Im Gebiet I ($U = 0$) hat die für $r = 0$ verschwindende Lösung die Form

$$\chi = A \sin kr, \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}.$$

Im Gebiet II ($U = U_0$) haben wir die allgemeine Lösung

$$\chi = B_+ \exp[\varkappa(r - r_1)] + B_- \exp[-\varkappa(r - r_1)], \quad \varkappa^2 = \frac{2\mu(U_0 - E)}{\hbar^2}.$$

Die Koeffizienten B_+ und B_- folgen aus der Stetigkeitsbedingung für χ und χ' an der Grenze der Gebiete I und II:

$$A \sin kr_1 = B_+ + B_-,$$

$$Ak \cos kr_1 = \varkappa(B_+ - B_-).$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} B_+ &= \frac{1}{2} A\left(\sin kr_1 + \frac{k}{\varkappa}\cos kr_1\right), \\ B_- &= \frac{1}{2} A\left(\sin kr_1 - \frac{k}{\varkappa}\cos kr_1\right). \end{aligned} \qquad (1)$$

Für das Gebiet III, in dem wieder $U = 0$ gilt, lautet die Lösung

$$\chi = C_+ \exp[ik(r - r_2)] + C_- \exp[-ik(r - r_2)].$$

Die Stetigkeitsbedingung an der Grenze zwischen den Gebieten II und III liefert

$$B_+ e^{\varkappa(r_2 - r_1)} + B_- e^{-\varkappa(r_2 - r_1)} = C_+ + C_-,$$

$$\varkappa(B_+ e^{\varkappa(r_2 - r_1)} - B_- e^{-\varkappa(r_2 - r_1)}) = ik(C_+ - C_-).$$

Daraus ergibt sich

$$C_+ = \frac{1}{2} B_+\left(1 + \frac{\varkappa}{ik}\right) e^{\varkappa(r_2 - r_1)} + \frac{1}{2} B_-\left(1 - \frac{\varkappa}{ik}\right) e^{-\varkappa(r_2 - r_1)},$$

$$C_- = \frac{1}{2} B_+\left(1 - \frac{\varkappa}{ik}\right) e^{\varkappa(r_2 - r_1)} + \frac{1}{2} B_-\left(1 + \frac{\varkappa}{ik}\right) e^{-\varkappa(r_2 - r_1)}.$$

Wir drücken C_+ (und C_-) mit Hilfe von (1) durch A aus:

$$C_+ = \frac{1}{4} A \sin kr_1 \left(1 + \frac{\varkappa}{ik}\right) e^{\varkappa(r_2 - r_1)} \tag{2}$$

$$\times \left\{1 + \frac{1 - \frac{\varkappa}{ik}}{1 + \frac{\varkappa}{ik}} e^{-2\varkappa(r_2 - r_1)} + \frac{k}{\varkappa} \cot kr_1 \left[1 - \frac{1 - \frac{\varkappa}{ik}}{1 + \frac{\varkappa}{ik}} e^{-2\varkappa(r_2 - r_1)}\right]\right\}.$$

Die Ausdrücke (1) und (2) bestimmen die Form der stationären Wellenfunktion des Teilchens. Die Eigenschaften der Wellenfunktion hängen wesentlich von der Teilchenenergie ab. Wir untersuchen die Energieabhängigkeit von C_+ und C_-. Nehmen wir $\varkappa(r_2 - r_1) \gg 1$ an, so können wir alle Terme vernachlässigen, die den Faktor $\exp[-2\varkappa(r_2 - r_1)]$ enthalten, und es wird

$$C_+ \approx \frac{1}{4} A \sin kr_1 \left(1 + \frac{\varkappa}{ik}\right) e^{\varkappa(r_2 - r_1)} \left\{1 + \frac{k}{\varkappa} \cot kr_1\right\},$$

$$C_- = C_+^*.$$

Ist die Größe in der geschweiften Klammer nicht zu klein, so sind die Koeffizienten C_+ und C_- groß gegen A. Das bedeutet, daß die Wellenfunktion nur im Gebiet III wesentlich von Null verschieden ist (Abb. 25a). Ist der Ausdruck in den Klammern von (2) klein, so können C_+ und C_- für gewisse Werte der Energie anormal kleine Werte annehmen. Diese Energien liegen in der Umgebung der Wurzeln E_n der transzendenten Gleichung

$$1 + \sqrt{\frac{E_n}{U_0 - E_n}} \cot \sqrt{\frac{2\mu E_n}{\hbar^2}}\, r_1 = 0$$

und werden als quasistationäre Niveaus bezeichnet.

Wie man leicht sieht, sind die E_n die realen Energienivaus des diskreten Spektrums für das in der Abb. 26 dargestellte Potential ($r_2 \to \infty$).

Daher sind die Wellenfunktionen, die den in schmalen Bereichen in der Umgebung der quasistationären Niveaus liegenden Energien entsprechen, im Gebiet III verschwindend klein (Abb. 25b).

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens mit definierter Energie im Gebiet I ist Null. Tatsächlich gehört die Wellenfunktion eines Teilchens mit definierter Energie zu einem kontinuierlichen Spektrum, und das Integral von $|\psi(r, E)|^2$ über das Gebiet III divergiert, während das Integral über das Gebiet I endlich ist. Das gilt auch für die Zustände in der Nähe der quasi-

stationären Niveaus. Zur Bestimmung der Austrittswahrscheinlichkeit des Teilchens aus dem Gebiet I haben wir einen Zustand zu untersuchen, der aus einer Superposition einer Reihe stationärer Zustände dicht beieinanderliegender Energien besteht, d. h. ein im Gebiet I lokalisiertes „Wellenpaket“,

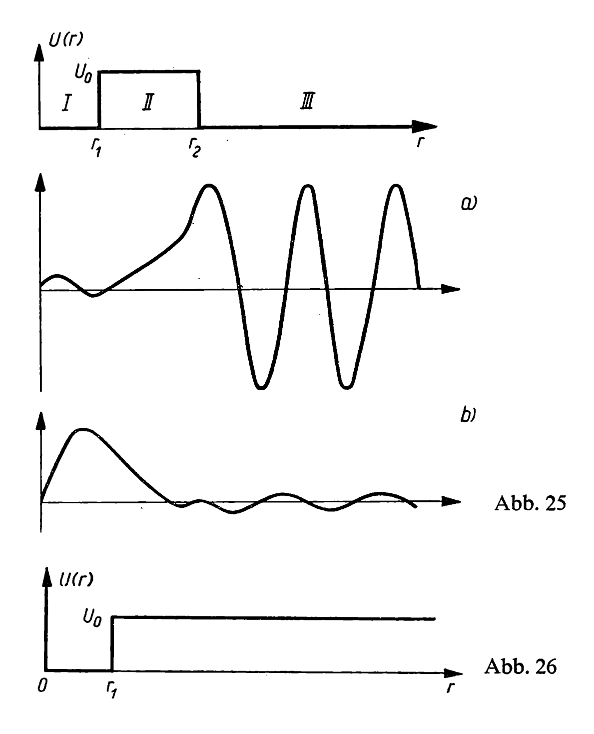


Abb. 25

Abb. 26

dessen Zerfließen im Laufe der Zeit wir betrachten müssen. Als Wellenfunktion für $t = 0$ wählen wir die Funktion χ_0, die im Gebiet III praktisch verschwindet und in den Gebieten I und II mit der Wellenfunktion des quasistationären Niveaus übereinstimmt.

Wir entwickeln $\chi_0(r)$ nach stationären Wellenfunktionen:

$$\chi_0(r) = \int_0^\infty \varphi(E)\, \chi_E(r)\, dE. \tag{3}$$

Wir nehmen an, daß die Funktionen $\chi_E(r)$ bezüglich der Energie normiert sind. Der Zustand des Teilchens zur Zeit t ist

$$\chi_0(r, t) = \int \varphi(E)\, \chi_E(r) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} Et\right] dE.$$

Wir betrachten die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Teilchen sich zur Zeit t im Anfangszustand $\chi_0(r)$ befindet:

$$W(t) = \left| \int_0^\infty \chi_0(r)\, \chi_0(r, t)\, dr \right|^2 = \left| \int_0^\infty |\varphi(E)|^2 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} Et \right] dE \right|^2. \qquad (4)$$

Das Problem reduziert sich also darauf, die Energieverteilung des Anfangszustandes $|\varphi(E)|^2$ aufzufinden.

Aus (3) folgt

$$\varphi(E) = \int_0^\infty \chi_0(r)\, \chi_E(r)\, dr. \qquad (5)$$

Nach dem oben Gesagten können wir für die Funktion $\chi_0(r)$ die Eigenfunktion eines Hilfsproblems mit dem in der Abb. 26 graphisch dargestellten Potential ansetzen:

Für $r < r_1$ ist dann

$$\chi_0(r) = a \sin k_0 r \qquad \left(k_0^2 = \frac{2\mu\, E_0}{\hbar^2} \right)$$

und für $r > r_1$

$$\chi_0(r) = -\frac{k_0}{\varkappa_0}\, a\, e^{-2\varkappa(r - r_1)}, \quad \varkappa^2 = \varkappa_0^2 - k_0^2.$$

Wir bestimmen k_0 aus der Bedingung

$$\sin k_0 r_1 = -\frac{k_0}{\varkappa_0}, \quad \cos k_0 r_1 = \frac{\varkappa}{\varkappa_0};$$

für die Normierungskonstante erhalten wir

$$a = \sqrt{\frac{2\varkappa}{1 + \varkappa r_1}}.$$

Die Funktionen $\chi_E(r)$ in den Gebieten I, II, III wurden nur bis auf den gemeinsamen Faktor A genau bestimmt. Wir müssen nun A so wählen, daß $\chi_E(r)$ im Energieraum normiert ist. Die asymptotische Form von $\chi_E(r)$ wird durch die Werte der Koeffizienten C_+ und C_- bestimmt. Die Normierung

$$\int_0^\infty \chi_E(r)\, \chi_{E'}^*(r)\, dr = \delta(E - E')$$

liefert

$$|C_+| = |C_-| = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{2\pi\, k}}.$$

Daraus läßt sich mit Hilfe von (2) die Relation zwischen A und der Energie finden. Oben stellten wir fest, daß das Verhältnis

$$\frac{|C_+|}{A(E)} = \frac{\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{\mu}{2\pi k}}}{A(E)}$$

für praktisch alle Energiewerte groß und nur dann klein ist, wenn E in der Nähe eines quasistationären Niveaus liegt. Daher besitzt $\varphi(E)$ in der Nähe von

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu}$$

ein scharfes Maximum. In den Gebieten anderer quasistationärer Niveaus wird, obgleich $A(E)$ wiederum zunimmt, das Integral in (5) nahezu Null sein, da die Funktion $\chi_0(r)$ fast orthogonal zu den Eigenfunktionen $\chi_E(r)$ ist, die zu den übrigen quasistationären Niveaus gehören. Folglich sind im Ausdruck (4) für die Wahrscheinlichkeit $W(t)$ die Werte von E in der Nähe von E_0 wichtig.

Unter Berücksichtigung dieser Vorbemerkungen können wir $\varphi(E)$ berechnen. Zunächst ermitteln wir die Relation zwischen A und E. Mit Hilfe der Ausdrücke (2) für C_+ und C_- erhalten wir

$$C_+ = C_-^* = \frac{1}{2} B_+ \left(1 + \frac{\varkappa}{ik}\right) e^{\varkappa(r_2 - r_1)} + \frac{1}{2} B_- \left(1 - \frac{\varkappa}{ik}\right) e^{-\varkappa(r_2 - r_1)}.$$

Ferner sind B_+ und B_- folgendermaßen mit A verknüpft:

$$B_+ = \frac{A}{2}\left(\sin kr_1 + \frac{k}{\varkappa}\cos kr_1\right),$$

$$B_- = \frac{A}{2}\left(\sin kr_1 - \frac{k}{\varkappa}\cos kr_1\right).$$

In der Nähe der quasistationären Niveaus können wir $k - k_0 = \Delta k$ setzen und annehmen, daß die Bedingungen

$$|\Delta k| \ll k_0 \quad \text{und} \quad |\Delta k| \ll \varkappa \tag{6}$$

erfüllt sind. Dann sind die wesentlichsten Terme in B_+ und B_-

$$B_+ = \frac{A}{2} \frac{\varkappa_0}{\varkappa^2} (1 + \varkappa r_1) \Delta k,$$

$$B_- = -A \frac{k_0}{\varkappa_0}.$$

Unter der Voraussetzung $e^{-\varkappa(r_2-r_1)} \ll 1$ erhalten wir

$$|C_\pm| = \frac{A}{4}\frac{\varkappa_0^2}{k\varkappa^2}(1+\varkappa r_1)\,e^{\varkappa(r_2-r_1)} \times \sqrt{(\Delta k)^2 + \left(\frac{4\varkappa^3}{\varkappa_0^4}\frac{k^2}{1+\varkappa r_1}e^{-2\varkappa(r_2-r_1)}\right)^2},$$

und wegen

$$|C_+| = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{\mu}{2\pi k}}$$

folgt

$$A(E) = \frac{\dfrac{1}{\hbar}\sqrt{\dfrac{\mu}{2\pi k}}\,\dfrac{4k\varkappa^2}{\varkappa_0^2(1+\varkappa r_1)}\,e^{-\varkappa(r_2-r_1)}}{\sqrt{(\Delta k)^2 + \left(\dfrac{4\varkappa^3}{\varkappa_0^4}\dfrac{k^2}{1+\varkappa r_1}e^{-2\varkappa(r_2-r_1)}\right)^2}}.$$

Das Integral (5) für $\varphi(E)$ kann nun ohne Schwierigkeiten berechnet werden, wenn man von vornherein voraussetzt, daß die Ungleichungen (6) erfüllt sind. In den Gebieten I und II unterscheidet sich die Funktion $\chi_E(r)$ nur wenig von $\dfrac{A(E)}{a}\chi_0$, während ihr Verlauf im Gebiet III für die Bestimmung von $\varphi(E)$ nicht wesentlich ist, da $\chi_0(r)$ für $r > r_1$ exponentiell abfällt.

Es gilt also

$$\varphi(E) = \frac{A(E)}{a}\int_0^\infty \chi_0^2(r)\,dr = \frac{A(E)}{a}.$$

Einfache Umformungen führen auf

$$\varphi^2(E) = \frac{\hbar}{2\pi\tau}\,\frac{1}{(E-E_0)^2 + \dfrac{\hbar^2}{4\tau^2}}$$

mit

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2}{\mu}k_0\,\Delta k$$

und

$$\tau = \frac{\mu}{8\hbar}\frac{\varkappa_0^4}{\varkappa^3 k^3}e^{2\varkappa(r_2-r_1)}(1+\varkappa r_1).$$

Integrieren wir in (4), so erhalten wir das Zerfallsgesetz

$$W(t) = e^{-t/\tau}.$$

Die Wahrscheinlichkeit $W(t)$, daß das Teilchen innerhalb der Barriere im Anfangszustand bleibt, nimmt in der Zeit

$$\tau = \frac{1}{16} \frac{\hbar}{U_0} \left(\frac{U_0^2}{E(U_0 - E)} \right)^{3/2} e^{2\varkappa(r_2 - r_1)} (1 + \varkappa r_1)$$

auf den e-ten Teil ab.

6. BEWEGUNG EINES TEILCHENS IM MAGNETFELD

6.1. Nach der klassischen Mechanik bewegt sich ein Elektron im homogenen Magnetfeld längs einer Schraubenlinie, deren Achse die Richtung des Magnetfeldes hat. Die Bewegung in der zur Magnetfeldrichtung senkrechten Ebene erfolgt mit der doppelten LARMOR-Frequenz $2\omega_0$ $\left(\omega_0 = \dfrac{eH}{2\mu c}\right)$. Wir betrachten die Bewegung eines Wellenpaketes auf der Grundlage der Quantenmechanik. Die SCHRÖDINGER-Gleichung eines Teilchens im Magnetfeld besitzt die Form

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi + \frac{\hbar \omega_0}{i} \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial y} - y \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 (x^2 + y^2) \Psi .$$

Es ist zweckmäßig, ein rotierendes Koordinatensystem einzuführen:

$$\left.\begin{aligned} x &= x' \cos \omega_0 t' - y' \sin \omega_0 t', \\ y &= x' \sin \omega_0 t' + y' \cos \omega_0 t', \\ z &= z', \\ t &= t', \\ \Psi(x, y, z, t) &= \Psi'(x', y', z', t'). \end{aligned}\right\} \qquad (1)$$

Es gilt dann

$$\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t} + \omega_0 \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad \Delta' = \Delta .$$

Die SCHRÖDINGER-Gleichung lautet in den neuen Variablen

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t'} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta' \Psi' + \frac{1}{2} \mu \omega_0^2 (x'^2 + y'^2) \Psi' .$$

Diese Gleichung kann durch Separation der Variablen x', y', z' gelöst werden. Die Gleichung für die Funktion $\varphi(z')$ beschreibt die Bewegung eines freien

Teilchens in Richtung der z-Achse. Die Lösung der Gleichung, welche die Funktion $\psi(x, y, t)$ bestimmt, besitzt die Form

$$\psi(x, y, t) = \sum A_{nm} \chi_n \left(x' \sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}} \right) \chi_m \left(y' \sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}} \right) e^{-i\omega_0 t(n+m+1)}.$$

Dabei sind x' und y' nach (1) Funktionen der Koordinaten x, y und der Zeit t, χ_n die Eigenfunktion des harmonischen Oszillators und A_{nm} Koeffizienten, die so gewählt werden, daß die Anfangsbedingungen erfüllt sind. Der Ausdruck für $\psi(x, y, t)$ ändert sein Vorzeichen nur dann, wenn t um eine Periode $T = \pi/\omega_0$ der klassischen Bewegung zunimmt. Dann ändern x' und y' ihre Vorzeichen. Beachten wir, daß für die Eigenfunktion des harmonischen Oszillators

$$\chi_n(-\xi) = (-1)^n \chi_n(\xi)$$

gilt, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \psi\left(x, y, t + \frac{\pi}{\omega_0}\right) \\ &= \sum A_{nm}(-1)^n \chi_n \left(x' \sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}} \right) (-1)^m \chi_m \left(y' \sqrt{\frac{\mu\omega_0}{\hbar}} \right) \\ &\quad \times \exp\left[-i\omega_0 t(n + m + 1) - i\pi(n + m + 1)\right] \\ &= -\psi(x, y, t). \end{aligned}$$

In der zum Magnetfeld senkrechten Ebene wird das Wellenpaket also periodisch seine Form ändern, wobei die Periode gleich derjenigen der klassischen Bewegung im Magnetfeld ist. In Richtung des Magnetfeldes zerfließt das Wellenpaket wie das eines freien Teilchens. Die Wellenfunktion $\psi(x, y, t)$ läßt sich explizit angeben, wenn die Funktion zu Beginn die Form

$$\psi(x, y, 0) = \exp\left\{ -\frac{\alpha^2}{2} \left[(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 \right] + \frac{i p_{0x} x}{\hbar} + \frac{i p_{0y} y}{\hbar} \right\}$$

hat. Nehmen wir an, daß $A_{00} = 1$ gilt und alle übrigen A_{nm} verschwinden, so erkennen wir, daß sich ein solches Wellenpaket in der xy-Ebene nicht ausbreitet und daß sein Schwerpunkt die klassische Bahn beschreibt.

6.2. Um den Operator $\mathfrak{v}$ zu finden, gehen wir von der Vertauschungsregel für $\mathfrak{r}$ und den HAMILTON-Operator aus:

$$\mathfrak{v} = \frac{i}{\hbar}(H\mathfrak{r} - \mathfrak{r}H).$$

Wegen

$$H = \frac{1}{2\mu}\left(\mathfrak{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)^2 + U(\mathfrak{r})$$

erhalten wir

$$\mu\mathfrak{v} = \mathfrak{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}.$$

Daraus ergeben sich die Vertauschungsregeln für diese Operatoren:

$$v_x v_y - v_y v_x = \frac{e}{\mu^2 c}\left[-(p_x A_y - A_y p_x) + (p_y A_x - A_x p_y)\right]$$

$$= \frac{ie\hbar}{\mu^2 c}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} H_z.$$

Durch zyklische Vertauschung ergeben sich die beiden übrigen Beziehungen.

6.3. Wir legen die z-Achse in die Richtung des Magnetfeldes, dessen Feldstärke wir mit $|\mathfrak{H}|$ bezeichnen. Die Geschwindigkeitskomponenten des Teilchens genügen den Vertauschungsregeln

$$v_x v_y - v_y v_x = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c}|\mathfrak{H}|, \quad v_y v_z - v_z v_y = 0, \quad v_z v_x - v_x v_z = 0$$

(vgl. Aufgabe 6.2.). Der Energieoperator lautet

$$H = \frac{1}{2}\mu[v_x^2 + v_y^2 + v_z^2].$$

Wir stellen H als Summe zweier miteinander vertauschbarer Operatoren dar:

$$H_1 = \frac{1}{2}\mu[v_x^2 + v_y^2], \quad H_2 = \frac{1}{2}\mu v_z^2.$$

Die Eigenwerte von H sind gleich den Summen der Eigenwerte von H_1 und H_2. Wir bestimmen zunächst die Eigenwerte von H_1. Zu diesem Zweck führen wir die Größen

$$v_x = \alpha Q, \quad v_y = \alpha P$$

mit

$$\alpha = \sqrt{\frac{e\hbar|\mathfrak{H}|}{\mu^2 c}}$$

ein. In diesen Variablen lautet die Vertauschungsregel

$$PQ - QP = -i,$$

während der Operator H_1 die Form

$$\hbar \frac{e|\mathfrak{H}|}{2\mu c}(P^2 + Q^2)$$

hat. Mit den Ergebnissen der Aufgabe 1.6. erhalten wir die Eigenwerte von H_1:

$$E_{1n} = \hbar \frac{eH}{\mu c}\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (\mathrm{n} = 0, 1, 2, \ldots), \quad H = |\mathfrak{H}|.$$

Die Eigenwerte von H_2 bilden ein kontinuierliches Spektrum. Die Energie eines geladenen Teilchens, das sich im Magnetfeld bewegt, ist also

$$E_{nk_z} = \hbar \frac{eH}{\mu c}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu}.$$

6.4. Wir legen die z-Achse in die Richtung des Magnetfeldes und die x-Achse in die Richtung des elektrischen Feldes. Das Vektorpotential des Magnetfeldes wählen wir in der Form

$$A_y = |\mathfrak{H}|x, \quad A_x = A_z = 0.$$

Der HAMILTON-Operator ergibt sich in diesem Fall zu

$$H = \frac{1}{2\mu} p_x^2 + \frac{1}{2\mu}\left(p_y - \frac{e}{c}|\mathfrak{H}|x\right)^2 + \frac{1}{2\mu} p_z^2 - eEx.$$

Führen wir einen neuen Operator ein:

$$\pi = \frac{e|\mathfrak{H}|}{c} x - p_y - \frac{\mu c E}{|\mathfrak{H}|},$$

so erhalten wir für H den Ausdruck

$$H = \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{\pi^2}{2\mu} - \frac{p_y c E}{|\mathfrak{H}|} - \frac{\mu c^2 E^2}{2|\mathfrak{H}|^2} + \frac{p_z^2}{2\mu}.$$

Die Vertauschungsregel für p_x und π lautet

$$p_x \pi - \pi p_x = -i \frac{\hbar e|\mathfrak{H}|}{c}.$$

Daraus ergibt sich, daß die Eigenwerte des Operators

$$H_1 = \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{\pi^2}{2\mu}$$

mit den Energieniveaus eines Oszillators übereinstimmen, der mit der doppelten LARMOR-Frequenz schwingt:

$$E_{1n} = \hbar \frac{eH}{\mu c}\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad H = |\mathfrak{H}|.$$

Da die Operatoren p_y und p_z, die in den letzten Termen des HAMILTON-Operators auftreten, mit H_1 kommutieren, kann der Operator

$$H_2 = \frac{1}{2\mu} p_z^2 - \frac{p_y cE}{H} - \frac{\mu c^2 E^2}{2H^2}$$

gleichzeitig mit H_1 diagonalisiert werden.

Daher ist das Energiespektrum des Teilchens durch

$$E_{nk_yk_z} = \hbar \frac{eH}{\mu c}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu} - \frac{\hbar k_y cE}{H} - \frac{\mu c^2 E^2}{2H^2}$$

gegeben. Vergleicht man mit dem Resultat der vorigen Aufgabe, so erkennt man, daß das elektrische Feld die Entartung aufhebt, die auftritt, wenn nur ein Magnetfeld auf das Teilchen wirkt. Im elektrischen Feld hängen die Energieniveaus von drei Quantenzahlen ab.

6.5. Man erhält

$$\psi_{np_yp_z}(x, y, z) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z) - \frac{eH}{2\hbar c}\left(x - \frac{cp_y}{eH} - \frac{\mu c^2 E}{eH^2}\right)^2\right]$$

$$\times H_n\left[\sqrt{\frac{eH}{c\hbar}}\left(x - \frac{cp_y}{eH} - \frac{\mu c^2 E}{eH^2}\right)\right].$$

6.6. Es gilt

$$E_{nmk} = \hbar\sqrt{\omega^2 + \omega_0^2}\,(2n + |m| + 1) + \hbar\omega_0 m + \hbar\omega\left(k + \frac{1}{2}\right)$$

$$(n = 0, 1, 2, \ldots; m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots; k = 0, 1, 2, \ldots)$$

mit

$$\omega_0 = \frac{eH}{2\mu c}.$$

6.7. Das Ergebnis lautet

$$x(t) = \left(\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{x}{2}\right)\cos\omega t + \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{2}\right)\sin\omega t$$

$$+ \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{x}{2}\right),$$

$$y(t) = \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial y} - \frac{x}{2}\right)\sin\omega t + \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{2}\right)\cos\omega t$$

$$+ \left(\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{2}\right),$$

wobei

$$\omega = \frac{eH}{\mu c}$$

die doppelte Frequenz der LARMOR-Präzession ist.

6.8. Die SCHRÖDINGER-Gleichung besitzt in Zylinderkoordinaten ϱ, φ, z die Form

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial\varrho^2} + \frac{1}{\varrho}\frac{\partial\psi}{\partial\varrho} + \frac{1}{\varrho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right\} - \frac{ie\hbar}{2\mu c}H\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} + \frac{e^2H^2}{8\mu c^2}\varrho^2\psi = E\psi.$$

Wir suchen eine Lösung in der Form

$$\psi(\varrho, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} R(\varrho)\, e^{ik_z z}\, e^{im\varphi}$$

und führen neue Bezeichnungen ein:

$$\gamma = \frac{eH}{2c\hbar}, \quad \beta = \frac{2\mu E}{\hbar^2} - k_z^2.$$

In die Gleichung für die radiale Funktion $R(\varrho)$

$$R'' + \frac{1}{\varrho}R' + \left(\beta - \gamma^2\varrho^2 - 2\gamma m - \frac{m^2}{\varrho^2}\right)R = 0$$

führen wir die neue unabhängige Variable $\xi = \gamma\varrho^2$ ein. Wir erhalten

$$\xi R'' + R' + \left(-\frac{\xi}{4} + \lambda - \frac{m^2}{4\xi}\right)R = 0 \tag{1}$$

mit

$$\lambda = \frac{\beta}{4\gamma} - \frac{m}{2}.$$

Die gesuchte Funktion verhält sich für $\xi \to \infty$ wie $e^{-\xi/2}$ und ist für kleine ξ proportional zu $\xi^{|m|/2}$. Für die Lösung der Differentialgleichung (1) machen wir den Ansatz

$$R = e^{-\xi/2}\xi^{|m|/2}\, w(\xi).$$

Wir erhalten $w(\xi)$ aus der Gleichung

$$\xi w'' + (1 + |m| - \xi)\, w' + \left(\lambda - \frac{|m| + 1}{2}\right) w = 0,$$

welcher die konfluente hypergeometrische Funktion

$$w = F\left\{-\left(\lambda - \frac{|m| + 1}{2}\right),\quad |m| + 1;\ \xi\right\}$$

genügt. Damit die Wellenfunktion endlich bleibt, muß die Größe $\lambda - \frac{|m| + 1}{2}$ eine nichtnegative ganze Zahl n sein. Für die Energieniveaus finden wir also

$$E = \hbar\frac{eH}{\mu c}\left(n + \frac{|m|}{2} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu}.$$

6.9. In Zylinderkoordinaten ergibt sich

$$J_\varrho = 0,$$

$$J_\varphi = \left(\frac{e\hbar m}{\mu\varrho} - \frac{e^2 H}{2\mu\, c}\varrho\right) |\psi_{nmk_z}|^2,$$

$$J_z = \frac{e\hbar k_z}{\mu} |\psi_{nmk_z}|^2 .$$

6.10. In der Gleichung für die radiale Wellenfunktion R setzen wir $u = \sqrt{\varrho} R$ und erhalten

$$u'' + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} E - k_z^2 - \frac{1}{\varrho^2}\left(m + \frac{eH}{2\hbar c}\varrho^2\right)^2\right] u = 0,$$

wobei $m^2 - 1/4$ durch m^2 ersetzt wird.[1]) Der Ausdruck

$$U_{\text{eff}}(\varrho) = \frac{\hbar^2}{2\mu\,\varrho^2}\left(m + \frac{eH}{2\hbar c}\varrho^2\right)^2$$

---

[1]) Das ist der Substitution $l(l + 1) \to (l + 1/2)^2$ analog. Zur Rechtfertigung dieses Verfahrens vgl. Aufgabe 5.2.

kann als effektive potentielle Energie bei eindimensionaler Bewegung aufgefaßt werden.

Aus der Quantenbedingung

$$\int_{\varrho_1}^{\varrho_2} \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} E - k_z^2 - \frac{1}{\varrho^2}\left(m + \frac{eH}{2\hbar c}\varrho^2\right)^2}\, d\varrho = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

erhalten wir das Energiespektrum

$$E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu} = \frac{e\hbar H}{\mu c}\left(n + \frac{|m|}{2} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2}\right).$$

Die vom Minimum von $U_{\text{eff}}(\varrho)$ aus gemessene Energie

$$E' = \frac{e\hbar H}{\mu c}\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

stellt die Energie der radialen Bewegung dar, während

$$E'' = \frac{e\hbar H}{2\mu\, c}(m + |m|)$$

die Energie der Drehbewegung repräsentiert. Der Übergang zur klassischen Kreisbahn vollzieht sich unter der Bedingung $E' \ll E''$ oder $n \ll \frac{1}{2}(m + |m|)$. Diese Bedingung ist offensichtlich nur für positive m erfüllbar und läßt sich daher in der Form $n \ll m$ schreiben.

6.11. Setzt man den Ausdruck unter dem Wurzelzeichen gleich Null, so erhält man für $m > 0$

$$\varrho_{1,2} = \sqrt{\frac{2\hbar\, c}{eH}}\left(\sqrt{n + m + \frac{1}{2}} \pm \sqrt{n + \frac{1}{2}}\right).$$

6.12. Man erhält

$$\Delta\varrho \approx \sqrt{\frac{c\hbar}{eH}}.$$

6.14. Die PAULI-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = H_0\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} - \mu_0(\vec{\sigma}\mathfrak{H})\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix},$$

wobei

$$H_0 = \frac{1}{2\mu}\left(\mathfrak{p} - \frac{e}{c}\mathfrak{A}\right)^2 + eU$$

und μ_0 das magnetische Moment sind. Wir setzen die Wellenfunktion in der Form

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \varphi(x, y, z, t) \begin{pmatrix} s_1(t) \\ s_2(t) \end{pmatrix}$$

an. Dabei ist die Funktion φ Lösung der Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H_0 \varphi .$$

Für die Spinfunktion $\begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}$ erhalten wir die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} = -\mu_0 (\vec{\sigma} \mathfrak{H}) \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}.$$

6.15. Wegen $H_x = H_y = 0, \quad H_z = H(t)$ folgt

$$i\hbar \frac{\partial s_1}{\partial t} = -\mu_0 H(t)\, s_1 ,$$

$$i\hbar \frac{\partial s_2}{\partial t} = \mu_0 H(t)\, s_2 .$$

Die Lösungen dieser Gleichungen sind

$$s_1 = c_1 \exp \left[\frac{i\mu_0}{\hbar} \int_0^t H(t)\, dt \right],$$

$$s_2 = c_2 \exp \left[-\frac{i\mu_0}{\hbar} \int_0^t H(t)\, dt \right].$$

Die Konstanten c_1 und c_2 ergeben sich aus den Anfangsbedingungen

$$c_1 = \mathrm{e}^{-i\alpha} \cos \delta , \quad c_2 = \mathrm{e}^{+i\alpha} \sin \delta .$$

Aus der Form der Funktionen s_1 und s_2 geht hervor, daß die Wahrscheinlichkeit einer vorgegebenen Orientierung der z-Komponente des Spins nicht zeitlich variiert. Der Mittelwert der x-Komponente des Spins beträgt

$$\overline{s_x} = \frac{\hbar}{2} \sin 2\delta \cos \left\{ \frac{2\mu_0}{\hbar} \int_0^t H(t)\, dt - 2x \right\}.$$

Analog gilt

$$\overline{s_y} = -\frac{\hbar}{2} \sin 2\delta \sin \left\{ \frac{2\mu_0}{\hbar} \int_0^t H(t)\, dt - 2\alpha \right\}.$$

Die Richtung, in der die Spinkomponente gleich $+{}^1/_2$ ist, wird durch die Polarkoordinaten

$$\Theta = 2\delta, \quad \Phi = 2\left(\alpha - \frac{\mu_0}{\hbar}\int_0^t H(t)\,dt\right)$$

festgelegt.

Diese Richtung bewegt sich in der Zeit auf einem Kegelmantel. Bei konstanter Feldstärke rotiert die Gerade, „längs der der Spin gerichtet ist“, gleichförmig mit der Frequenz $2\mu_0 H/\hbar$ um die Magnetfeldrichtung.

6.16. Ein Zustand des einfallenden Bündels mit willkürlicher Polarisation kann immer als Superposition aus zwei Zuständen dargestellt werden, wobei in einem Zustand $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ der Spin parallel und im zweiten Zustand $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ antiparallel zur z-Achse gerichtet ist. Wir betrachten zunächst den Fall, daß die Spins der Neutronen im einfallenden Bündel in Richtung der z-Achse orientiert sind. Für die einfallende reflektierte und gestreute Welle haben wir dann

$$A\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}e^{i\mathfrak{k}\mathfrak{r}}, \quad B\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}e^{i\mathfrak{k}_1\mathfrak{r}}, \quad C\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}e^{i\mathfrak{k}_2\mathfrak{r}}.$$

Die Größen $\mathfrak{k}$, $\mathfrak{k}_1$, $\mathfrak{k}_2$ sind mit der Gesamtenergie E und dem magnetischen Moment μ_0 des Neutrons verknüpft:

$$\mathfrak{k} = \frac{\mathfrak{p}}{\hbar}, \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = E, \quad \frac{\hbar^2 k_1^2}{2\mu} = E, \quad \frac{\hbar^2 k_2^2}{2\mu} = E + \mu_0 H.$$

Aus den Stetigkeitsbedingungen für die Wellenfunktion und ihre Ableitung nach x an der Grenze zwischen den beiden Gebieten ($x = 0$) folgt

$$k_y = k_{1y} = k_{2y}, \quad k_z = k_{1z} = k_{2z},$$

$$A + B = C, \quad k_x A + k_{1x} B = k_{2x} C.$$

Aus diesen Beziehungen folgt $k_{1x} = -k_x$, d. h., der Einfallswinkel φ ist gleich dem Reflexionswinkel φ_1. Zur Vereinfachung setzen wir $k_y = 0$. Die Lösung der Gleichung lautet

$$\frac{B}{A} = \frac{k_x - k_{2x}}{k_x + k_{2x}}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k_x}{k_x + k_{2x}},$$

$$k_{2x} = k_x\sqrt{1 + \frac{2\mu}{\hbar^2 k_x^2}\,\mu_0 H}.$$

Wir erhalten den Reflexionskoeffizienten

$$R = \left(\frac{B}{A}\right)^2 = \left(\frac{k_x - k_{2x}}{k_x + k_{2x}}\right)^2.$$

Sind die Spins der Neutronen antiparallel zur z-Achse gerichtet, so erhalten wir im betrachteten Fall

$$k_{2x} = k_x \sqrt{1 - \frac{2\mu}{\hbar^2 k_x^2} \mu_0 H},$$

während die übrigen Resultate dieselben bleiben. Da μ_0 für das Neutron negativ ist, gilt für den Streuwinkel $\varphi_{2\uparrow} > \varphi > \varphi_{2\downarrow}$ (siehe Abb. 27).

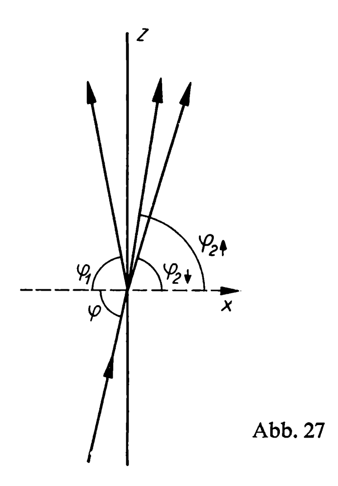


Abb. 27

Im Falle willkürlicher Orientierung der Neutronenspins hat die Wellenfunktion für das Gebiet $x > 0$ die Form

$$C_\uparrow \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} e^{-i\mathfrak{k}_\uparrow \mathfrak{r}} + C_\downarrow \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} e^{i\mathfrak{k}_\downarrow \mathfrak{r}},$$

wobei $C_\uparrow$ und $C_\downarrow$ die Entwicklungskoeffizienten des Anfangsspinzustandes nach den Zuständen $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ sind.

Eine einfache Abschätzung zeigt, daß merkliche Reflexion selbst für $H \approx 10^4$ nur bei sehr langsamen (thermischen) Neutronen ($\lambda \approx 1$ Å) und einem Einfallswinkel φ stattfindet, der sich von $\pi/2$ nur um Bruchteile eines Grades unterscheidet.

6.17. Die SCHRÖDINGER-Gleichung für die Spinfunktion in der z-Darstellung $\begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}$ besitzt die Form

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} \doteq -\mu \begin{pmatrix} H_z & H_x - iH_y \\ H_x + iH_y & -H_z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}$$

(μ ist das magnetische Moment des Teilchens).

Wir führen neue Bezeichnungen ein:

$$a = \frac{\mu}{\hbar} H \cos \vartheta, \quad b = \frac{\mu}{\hbar} H \sin \vartheta.$$

Mit diesen Größen erhalten wir die Gleichungen, die die Komponenten s_1 und s_2 bestimmen, in der Form

$$\frac{ds_1}{dt} = ias_1 + ib\, e^{-i\omega t} s_2,$$

$$\frac{ds_2}{dt} = ib\, e^{i\omega t} s_1 - ias_2.$$

Die Lösung dieses Gleichungssystems lautet

$$s_1 = A\, e^{ip_1 t} + B\, e^{ip_2 t},$$

$$s_2 = e^{i\omega t}\left[\frac{-a + p_1}{b} A\, e^{ip_1 t} + \frac{-a + p_2}{b} B\, e^{ip_2 t}\right]$$

mit

$$p_1 = \sqrt{\frac{1}{4}\omega^2 + a^2 + b^2 + \omega a} - \frac{\omega}{2},$$

$$p_2 = -\sqrt{\frac{1}{4}\omega^2 + a^2 + b^2 + \omega a} - \frac{\omega}{2}.$$

Die Größen A und B ergeben sich aus den Anfangsbedingungen und der Normierungsbedingung

$$|s_1|^2 + |s_2|^2 = 1.$$

Nach einfachen Rechnungen erhalten wir die Übergangswahrscheinlichkeit

$$P\left(^1/_2, -^1/_2\right) = \frac{\sin^2 \vartheta}{1 + q^2 - 2q \cos \vartheta} \sin^2\left[\frac{t}{2}\, \omega(1 - 2q \cos \vartheta + q^2)^{1/2}\right],$$

wobei q das Verhältnis der LARMOR-Frequenz ω_0 zur Frequenz ω des rotierenden Magnetfeldes ist:

$$q = -\frac{2\mu H}{\hbar\omega} = \frac{\omega_0}{\omega}.$$

Die Größe q ist positiv, wenn das Magnetfeld in Richtung der LARMOR-Präzession rotiert, und negativ, wenn die Rotation in entgegengesetzter Richtung erfolgt.

Ist der Winkel ϑ klein, d. h. $\sqrt{H_x^2 + H_y^2}/H_z \ll 1$, so beträgt die Übergangswahrscheinlichkeit näherungsweise

$$P\left({}^1/_2, -{}^1/_2\right) = \frac{\vartheta^2}{(1-q)^2 + q\vartheta^2} \sin^2\left[\frac{t}{2}\,\omega[(1-q)^2 + q\vartheta^2]^{1/2}\right].$$

Wie aus dieser Formel folgt, kann für den Fall, daß die Resonanzbedingung $\omega = \omega_0$ (d. h. $q = +1$) erfüllt ist, die Wahrscheinlichkeit für das Umklappen des magnetischen Moments bezüglich der Magnetfeldrichtung, $P({}^1/_2, -{}^1/_2) \approx \sin^2 {}^1/_2 t\omega\vartheta$, für gewisse Werte von t nahezu gleich 1 werden.

Ändert sich jedoch im betrachteten Fall die Drehrichtung des Magnetfeldes (oder das Vorzeichen von H_z), so erhalten wir für die Übergangswahrscheinlichkeit die Größe

$$P\left({}^1/_2, -{}^1/_2\right) = \frac{\vartheta^2}{4} \sin^2 \omega t,$$

die klein gegen 1 ist. Auf Grund dieses großen qualitativen Unterschiedes kann das Vorzeichen des magnetischen Momentes des Teilchens bestimmt werden.

6.18.

6.18.1.

$$x(t) = \frac{p_x}{m} t + x,$$

$$y(t) = -\frac{\mu k}{2m} t^2 \sigma_y + \frac{p_y}{m} t + y,$$

$$z(t) = \frac{\mu k}{2m} t^2 \sigma_z + \frac{p_z}{m} t + z.$$

6.18.2.

$$\overline{z(t)} = (\bar{z})_0 + \frac{\mu k}{2m} t^2(\alpha\alpha^* - \beta\beta^*),$$

$$\overline{y(t)} = (\bar{y})_0 - \frac{\mu k}{2m} t^2(i\beta^*\alpha - i\beta\alpha^*),$$

$$\overline{x(t)} = (\bar{x})_0 + \frac{p_0}{m} t,$$

$$\overline{(\Delta z)_t^2} = \overline{(\Delta z)_0^2} + \frac{\mu^2 k^2}{4m^2} t^4[1 - (\alpha\alpha^* - \beta\beta^*)^2] + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2} \int \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z}\right)^2 d\tau,$$

$$\overline{(\Delta y)_t^2} = \overline{(\Delta y)_0^2} + \frac{\mu^2 k^2}{4m^2} t^4[1 - (i\beta^*\alpha - i\beta\alpha^*)^2] + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2} \int \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right)^2 d\tau,$$

$$\overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_0^2} + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2} \int \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)^2 d\tau.$$

Anmerkung. Wir betrachten als Beispiel eine Gruppe von Teilchen, für die die z-Komponente des Spins bei $t = 0$ mit Sicherheit gleich $+{}^1/_2$, d. h. $\alpha = 1, \beta = 0$ ist. Aus den Resultaten erkennt man sofort folgendes: Bewegen sich solche Teilchen in einem inhomogenen Magnetfeld, so erzeugen sie auf einem Schirm, der auf ihrer Bahn aufgestellt wird, zwei Flecke, welche dieselben z-Koordinaten, aber y-Koordinaten mit entgegengesetzten Vorzeichen besitzen.

6.19. Die Magnetfeldrichtung läßt sich durch die beiden Polarwinkel ϑ und φ festlegen, welche Funktionen der Zeit sind. Wir können den HAMILTON-Operator für das neutrale Teilchen in der Form

$$H = -\mu|\mathfrak{H}|(J_x \sin\vartheta \cos\varphi + J_y \sin\vartheta \sin\varphi + J_z \cos\vartheta)$$

schreiben, wobei $|\mathfrak{H}|$ der Absolutbetrag der magnetischen Feldstärke ist. Wir bezeichnen den Drehimpulsoperator in Magnetfeldrichtung mit J_ξ,

$$J_\xi = J_x \sin\vartheta \cos\varphi + J_y \sin\vartheta \sin\varphi + J_z \cos\vartheta,$$

und führen die Eigenfunktionen $\psi_m(t)$ des Operators J_ξ ein:

$$J_\xi \psi_m(t) = m\psi_m(t).$$

Die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

setzen wir in der Form

$$\psi = \sum a_m(t)\, \psi_m(t)$$

an. Bekanntlich gilt (vgl. Aufgabe 4.20.)

$$\psi_m(t) = \exp(-iJ_z\varphi) \exp(-iJ_y\vartheta)\, \psi_m^{(0)},$$

wobei $\psi_m^{(0)}$ der Gleichung

$$J_z\psi_m^{(0)} = m\psi_m^{(0)}$$

genügt. Zunächst berechnen wir $\dot{\psi}_m(t)$. Mit den Beziehungen

$$\exp(iJ_y\vartheta)\, J_z \exp(-iJ_y\vartheta) = J_z \cos\vartheta - J_x \sin\vartheta,$$

$$J_x\psi_m^{(0)} = \frac{1}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\, \psi_{m-1}^{(0)} + \frac{1}{2}\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\, \psi_{m+1}^{(0)},$$

$$J_y\psi_m^{(0)} = \frac{i}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\, \psi_{m-1}^{(0)} - \frac{i}{2}\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\, \psi_{m+1}^{(0)}$$

folgt

$$\dot{\psi}_m(t) = (-i\dot{\varphi} m \cos\vartheta)\, \psi_m(t) + \frac{1}{2}\sqrt{(j+m+1)(j-m)}\, (i\dot{\varphi}\sin\vartheta - \dot{\vartheta})\, \psi_{m+1}(t) + \frac{1}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\, (i\dot{\varphi}\sin\vartheta + \dot{\vartheta})\, \psi_{m-1}(t).$$

Setzen wir $\dot{\psi}_m(t)$ in den Ausdruck

$$i\hbar \sum \{\psi_m(t)\, \dot{a}_m(t) + a_m(t)\, \dot{\psi}_m(t)\} = -\mu|\mathfrak{H}| \sum_m m\, a_m(t)\, \psi_m(t)$$

ein, so erhalten wir ein Gleichungssystem, das die zeitliche Änderung der Koeffizienten a_m bestimmt:

$$i\hbar \frac{da_m}{dt} + m\mu|\mathfrak{H}|a_m = -m\hbar\dot{\varphi}\cos\vartheta\, a_m + \frac{1}{2}\hbar(\dot{\varphi}\sin\vartheta + i\dot{\vartheta})\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\, a_{m-1} + \frac{1}{2}\hbar(\dot{\varphi}\sin\vartheta - i\dot{\vartheta})\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\, a_{m+1}.$$

Gilt

$$\dot{\varphi} \ll \frac{\mu H}{\hbar}, \quad \dot{\vartheta} \ll \frac{\mu H}{\hbar}, \quad H = |\mathfrak{H}|.$$

d. h., ist die Winkelgeschwindigkeit der Änderung der Magnetfeldrichtung klein gegen die Präzessionsfrequenz, so kann man in diesem Gleichungssystem die rechte Seite vernachlässigen und erhält

$$a_m \sim \exp\left[i\frac{m\mu H}{\hbar}t\right].$$

In diesem Fall ist also die Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen Werte der Drehimpulskomponente in Richtung des zeitlich veränderlichen Magnetfeldes konstant.

6.20.

$$E(m = -1) = 2\mu H - \mu^2 a^{-3}(3\cos^2\vartheta - 1),$$

$$E(m = 0) = 2\mu^2 a^{-3}(3\cos^2\vartheta - 1),$$

$$E(m = 1) = -2\mu H - \mu^2 a^{-3}(3\cos^2\vartheta - 1).$$

Ein ähnliches Problem tritt auf, wenn man die magnetische Kernresonanz z. B. in Gips $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ betrachtet. Gips enthält Protonenpaare, die genügend weit voneinander entfernt sind, so daß man sich den Kristall in erster Näherung als aus einer Anzahl unabhängiger magnetischer Kernpaare aufgebaut denken kann, wobei jeder Kern nur mit seinem Partner in Wechselwirkung steht.

6.22. Da die magnetische Wechselwirkung zwischen den Kernen als klein vorausgesetzt wird, besitzt der HAMILTON-Operator die Form

$$H = g\beta|\mathfrak{H}| \sum_{j=1}^{3} I_{zj} + V$$

mit

$$V = \sum A_{jk}(\mathfrak{J}_j\mathfrak{J}_k - 3I_{zj}I_{zk})$$

(vgl. Aufgabe 6.21.).

Der Zustand des aus drei Kernen bestehenden Systems wird durch den folgenden Satz von Größen charakterisiert:

$$\mathfrak{J}'^2 \; (\mathfrak{J}' = \mathfrak{J}_1 + \mathfrak{J}_2), \quad \mathfrak{J}^2 \; (\mathfrak{J}_1 + \mathfrak{J}_2 + \mathfrak{J}_3 = \mathfrak{J}),$$

$$I_z \; (I_z = I_{1z} + I_{2z} + I_{3z}).$$

Berechnen wir die Matrix, so erhalten wir

$$\begin{array}{ll} I_z = \tfrac{3}{2} \; I = \tfrac{3}{2} & \\ I_z = \tfrac{1}{2} \begin{cases} I = \tfrac{3}{2} & \\ I = \tfrac{1}{2} & J = 0 \\ I = \tfrac{1}{2} & J = 1 \end{cases} \end{array} \qquad \begin{pmatrix} -2\alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\alpha & \beta & \gamma \\ 0 & \beta & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

mit

$$\alpha = \frac{1}{4}(A_{12} + A_{23} + A_{31}), \quad \gamma = \frac{\sqrt{2}}{4}(2A_{12} - A_{13} - A_{21}),$$

$$\beta = \frac{\sqrt{6}}{4}(A_{13} - A_{23}), \quad \delta^2 = \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2.$$

Für $I_z = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}$ hat die Matrix V dieselbe Form. Die Eigenwerte der Matrix der Dipol-Dipol-Energie sind -2α, 0, $\alpha + \delta$, $\alpha - \delta$. Für die gesuchten Energieniveaus erhalten wir die folgenden Werte ($|\mathfrak{H}| = H$):

$$E_1 = \frac{3}{2} g\beta H - 2\alpha; \qquad E_5 = -\frac{3}{2} g\beta H - 2\alpha,$$

$$E_2 = \frac{1}{2} g\beta H, \qquad E_6 = -\frac{1}{2} g\beta H,$$

$$E_3 = \frac{1}{2} g\beta H + \alpha + \delta, \quad E_7 = -\frac{1}{2} g\beta H + \alpha + \delta,$$

$$E_4 = \frac{1}{2} g\beta H + \alpha - \delta, \quad E_8 = -\frac{1}{2} g\beta H + \alpha - \delta.$$

6.23. Wir legen die z-Achse in die Richtung des Magnetfeldes. Der HAMILTON-Operator besitzt die Form

$$H = g\beta|\mathfrak{H}|I_z + V, \quad V = \frac{1}{2} A \sum \varphi_{ik}(I_i I_k + I_k I_i)$$

mit

$$A = \frac{Q_0}{2I(2I - 1)}, \quad \varphi_{ik} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \, \partial x_k}.$$

Wir erhalten die Matrixelemente

$$(m\,|V|\,m) = \frac{A\varphi_{33}}{2}\{3m^2 - I(I+1)\},$$

$$(m\,|V|\,m\pm 1) = \frac{A(\varphi_{31} \pm i\varphi_{23})}{2}(2m\pm 1)\{(I\mp m)(I\pm m+1)\}^{1/2},$$

$$(m\,|V|\,m\pm 2) = \frac{A(\varphi_{11} - \varphi_{22} \pm 2i\,\varphi_{12})}{4}$$
$$\times \{(I\mp m)(I\mp m-1)(I\pm m+1)(I\pm m+2)\}^{1/2}.$$

Mit Hilfe der gewöhnlichen Störungstheorie folgt für die Energieniveaus in zweiter Näherung

$$E_m = mg\beta H + \frac{A}{2}\{3m^2 - I(I+1)\}\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}$$
$$+ \frac{A}{2}m\frac{\left|\frac{\partial^2\varphi}{\partial x\,\partial z} - i\frac{\partial^2\varphi}{\partial y\,\partial z}\right|^2}{g\beta H}\{4I(I+1) - 8m^2 - 1\}$$
$$+ \frac{A^2}{8}m\frac{\left|\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} + 2i\frac{\partial^2\varphi}{\partial x\,\partial y}\right|^2}{g\beta H}\{2I(I+1) - 2m^2 - 1\}.$$

Die Ableitung des elektrostatischen Potentials φ wird an der Stelle genommen, an der sich der Kern befindet.

7. ATOM

7.1. Aus der angegebenen Ungleichung ergibt sich

$$\int |\nabla\psi|^2\,d\tau + Z\int (\nabla|\psi|^2\,\nabla r)\,d\tau + Z^2\int (\nabla r)^2\,|\psi|^2\,d\tau \geqq 0.$$

Integriert man im zweiten Term partiell und beachtet

$$(\nabla r)^2 = 1 \quad \text{und} \quad \Delta r = 2/r,$$

so erhält man

$$\frac{1}{2}\int |\nabla\psi|^2\,d\tau - \int \frac{Z}{r}|\psi|^2\,d\tau \geqq -\frac{Z^2}{2}\int |\psi|^2\,d\tau.$$

Die linke Seite dieser Gleichung ist gleich dem Mittelwert des HAMILTON-Operators (im Maßsystem mit $e = \hbar = \mu = 1$)

$$H = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{Z}{r}$$

im Zustand ψ. Der niedrigste Energiewert ist $-Z^2/2$. Das Atom befindet sich dann in einem Zustand mit der Wellenfunktion ψ_0, die der Differentialgleichung erster Ordnung

$$\nabla\psi_0 + Z\psi_0 \nabla r = 0$$

genügt, aus der

$$\psi_0 \sim e^{-Zr}$$

folgt.

7.5. Zunächst berechnen wir die Wellenfunktionen in der Impulsdarstellung nach der allgemeinen Formel

$$\varphi(\mathfrak{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint e^{-i\frac{\mathfrak{p}\mathfrak{r}}{\hbar}} \psi(\mathfrak{r})\, d\tau.$$

Für den $1s$-Zustand finden wir

$$\varphi_{1s}(p) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{2a}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{\left(\frac{p^2a^2}{\hbar^2} + 1\right)^2}.$$

Analog ergibt sich für den $2s$-Zustand

$$\varphi_{2s}(p) = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{2a}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{\frac{p^2a^2}{\hbar^2} - \frac{1}{4}}{\left(\frac{p^2a^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)^3}.$$

Dem $2p$-Zustand entsprechen drei Eigenfunktionen ($m_z = -1, 0, +1$):

$$\varphi_{2p}^{(0)}(p) = -i\frac{1}{\pi}\left(\frac{a}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{p_z a}{\hbar\left(\frac{p^2a^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)^3},$$

$$\varphi_{2p}^{(\pm 1)}(p) = -\frac{i}{\pi\sqrt{2}}\left(\frac{a}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{(p_x \pm ip_y)\, a}{\hbar\left(\frac{p^2a^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)^3}.$$

Mit Hilfe dieser Ausdrücke läßt sich die normierte Impulsverteilung $w(\mathfrak{p}) = |\varphi(\mathfrak{p})|^2$ berechnen.

7.6. Man erhält

$$\sqrt{\overline{r^2} - \bar{r}^2} = \frac{\sqrt{n^2(n^2+2) - l^2(l+1)^2}}{2}.$$

Bei vorgegebenem n besitzt dieser Ausdruck für „Kreisbahnen", d. h. für $l = n - 1$, ein Minimum:

$$\sqrt{\overline{r^2} - \bar{r}^2} = \frac{1}{2} n \sqrt{2n+1}, \quad \frac{\sqrt{\overline{r^2} - \bar{r}^2}}{\bar{r}} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}}.$$

7.7. Für $n_1 = 1$, $n_2 = 0$, $m = 0$ folgt

$$\psi_{1,0,0}(\xi, \eta, \varphi) = -\frac{1}{\sqrt{2}} R_{20}(r)\, Y_{00}(\vartheta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r)\, Y_{10}(\vartheta, \varphi).$$

7.9. In der klassischen relativistischen Mechanik lautet die HAMILTON-Funktion

$$H = \sqrt{\mu^2 c^4 + p^2 c^2} - \mu c^2 + U(r) \approx \frac{p^2}{2\mu} + U(r) + H_1$$

mit

$$H_1 = -\frac{p^4}{8\mu^3 c^2}.$$

Wir fassen nun $\mathfrak{p}$ als Operator auf,

$$\mathfrak{p} = -i\hbar\nabla,$$

und betrachten H_1 als kleine Störung. In unserer Näherung hat die SCHRÖDINGER-Gleichung die Form

$$\left[\frac{p^2}{2\mu} + U(r)\right]\psi = E\psi,$$

und die gesuchte Energiekorrektion im Zustand n, l, m beträgt

$$\Delta E_1 = -\frac{1}{8\mu^3 c^2}\int \psi^* p^4 \psi \, d\tau = -\frac{1}{2\mu c^2}\int \psi^* (E - U(r))^2 \psi \, d\tau$$

$$= \frac{3E^2}{2\mu c^2} - \frac{\left(\frac{\mu e^4}{\hbar^2}\right)^2}{n^3 \mu c^2 (2l+1)} = \left[\frac{2}{8n^4} - \frac{1}{(2l+1)\, n^3}\right] \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2.$$

7.10. Statt von den ungestörten Wellenfunktionen mit definierten Werten von l_z und s_z auszugehen und die Säkulargleichung zu lösen, ist es zweckmäßig, als ungestörte Wellenfunktionen die Eigenfunktionen von $\mathfrak{l}^2$ und $\mathfrak{j}^2$ zu wählen, wobei $\mathfrak{j} = \mathfrak{l} + \mathfrak{s}$ der Gesamtdrehimpuls ist, der, wie man sofort sieht, mit H_2 vertauschbar ist. Beachten wir, daß der Operator

$$\mathfrak{j}^2 = l(l+1) + s(s+1) + 2\mathfrak{l}\mathfrak{s}$$

in Anwendung auf diese Funktionen $j(j+1)$ ergibt, so erhalten wir

$$\Delta E_2 = \bar{H}_2 = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{4\mu^2 c^2} \hbar^2 \overline{\left(\frac{1}{r}\frac{dU}{dr}\right)}.$$

Für das Wasserstoffatom gilt $U = -e^2/r$ und daher

$$\overline{\left(\frac{1}{r^3}\right)} = \frac{1}{n^3(l+1)(l+\frac{1}{2})\,l}\left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^3,$$

woraus schließlich folgt

$$\Delta E_2 = \frac{\mu e^4}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{4n^3\, l(l+\frac{1}{2})(l+1)}.$$

Diese Formel läßt sich vereinfachen, da im betrachteten Fall $s = \frac{1}{2}$ gilt und die beiden Fälle $j = l - \frac{1}{2}$ und $j = l + \frac{1}{2}$ möglich sind. Wie man leicht verifiziert, gilt

$$j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) = \begin{cases} l & \text{für } j = l + \frac{1}{2}, \\ -(l+1) & \text{für } j = l - \frac{1}{2}; \end{cases}$$

für beliebige j und l ergibt sich somit

$$\Delta E_2 = \frac{\mu e^4}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{1}{2n^3}\left(-\frac{1}{j+\frac{1}{2}} + \frac{1}{l+\frac{1}{2}}\right).$$

Addiert man ΔE_2 zur Korrektion ΔE_1, welche die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Masse berücksichtigt (vgl. die vorige Aufgabe), so erhält man

$$\Delta E = \frac{\mu e^4}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{1}{n^3}\left(\frac{3}{8n} - \frac{1}{2j+1}\right).$$

Dieser Ausdruck hängt nicht von l ab, d. h., zwei Niveaus mit gleichem j und verschiedenem l besitzen dieselbe Energie (die Niveaus sind entartet).

7.12. Beim β-Zerfall wandelt sich der Tritiumkern in den Kern des He-Isotops ^{3}He um. Der Einfluß des β-Zerfalls auf das Atomelektron besteht im wesentlichen darin, daß die potentielle Energie des Elektrons im Atom für die kurze

Zeit $t \ll \hbar^3/\mu e^4$ gestört wird und nicht $U = -e^2/r$, sondern $U = -2e^2/r$ ist. Wir können die Zeit t abschätzen, indem wir annehmen, daß sie gleich der Zeit ist, in welcher das β-Elektron durch das Atom hindurchfliegt:

$$t \approx \frac{a_0}{v},$$

worin $a_0 = \hbar^2/\mu c^2$ und v die Geschwindigkeit des β-Elektrons ist. Da die Energie des β-Elektrons von der Größenordnung einiger keV ist, finden wir $t \approx 0{,}1\hbar^3/\mu e^4$. Aus der SCHRÖDINGER-Gleichung folgt, daß sich die Wellenfunktion in der Zeit t praktisch nicht ändert:

$$\delta\psi \approx \frac{e^2}{r}\,\frac{t}{i\hbar}\,\psi \ll \psi.$$

Wir entwickeln die Wellenfunktion ψ des Elektrons nach Eigenfunktionen des Elektrons im Feld mit $Z = 2$:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n + \int c_{\mathfrak{k}} \psi_{\mathfrak{k}}\, d\mathfrak{k}.$$

Die Entwicklungskoeffizienten

$$c_n = \int \psi \psi_n \, d\tau,$$

$$c_{\mathfrak{k}} = \int \psi \psi_{\mathfrak{k}} \, d\tau$$

bestimmen die Wahrscheinlichkeit der Anregung

$$w_n = \sum |c_n|^2$$

und der Ionisation

$$w_{\text{ion}} = \int |c_{\mathfrak{k}}|^2 \, d\mathfrak{k}.$$

Da ψ eine kugelsymmetrische Funktion ist, sind die c_n und $c_{\mathfrak{k}}$ nur dann von Null verschieden, wenn die durch n bzw. k charakterisierten Zustände s-Zustände sind ($l = 0$).

Wegen

$$R_{n0}^{(Z)} = 2\left(\frac{Z}{n}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{n}} F\left(-n + 1, 2; \frac{2Zr}{n}\right)$$

finden wir

$$c_n = \int_0^\infty R_{n0}^{(Z)} R_{10}^{(Z')} r^2 \, dr$$

$$= \frac{8}{\left(Z' + \frac{Z}{n}\right)^3} \left(\frac{ZZ'}{n}\right)^{3/2} F\left(-n + 1, 3, 2; \frac{2Z}{nZ' + Z}\right).$$

Mit $Z = 2$, $Z' = 1$ erhalten wir für $n = 1$

$$c_1 = \frac{16\sqrt{2}}{27},$$

d. h., die Wahrscheinlichkeit, das Ion ^{3}He im Grundzustand vorzufinden, beträgt

$$w_1 = |c_1|^2 = \left(\frac{8}{9}\right)^3 \approx 0{,}70.$$

Folglich ist die Gesamtwahrscheinlichkeit für Anregung und Ionisation

$$1 - w_1 \approx 0{,}30.$$

Für $n = 2$, $c_2 = -\frac{1}{2}$ folgt $w_2 = 0{,}25$.

Mit Hilfe der Beziehung

$$F(\alpha, \beta, \gamma; x) = (1 - x)^{\gamma - \alpha - \beta} F(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma; x)$$

folgt

$$w_n = |c_n|^2 = \frac{2^9 n^5 (n - 2)^{2n-4}}{(n + 2)^{2n+4}}.$$

Wir geben die mit dieser Formel berechneten Anregungswahrscheinlichkeiten für einige der ersten Niveaus an:

$$w_1 = \left(\frac{8}{9}\right)^3, \quad w_2 = \frac{1}{4}, \quad w_3 = \frac{2^9\, 3^5}{5^{10}} \approx 1{,}3\%,$$

$$w_4 = \frac{2^{23}}{2^{12}\, 3^{12}} \approx 0{,}39\%.$$

7.13. Der HAMILTON-Operator lautet (alle Rechnungen werden in atomaren Einheiten $e = \hbar = \mu = 1$ durchgeführt):

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}.$$

Wenden wir die Variationsmethode an, so haben wir das Integral

$$E(Z') = \int \psi^*(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2)\, H\psi(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2)\, d\tau_1\, d\tau_2$$

zu berechnen und Z' aus der Bedingung $\dfrac{dE}{dZ'} = 0$ zu bestimmen.

Im betrachteten Fall gilt

$$\psi(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2) = c\, \mathrm{e}^{-Z'(r_1 + r_2)}$$

mit der Normierungskonstanten $c = Z'^3/\pi$.

Die Integrale der ersten vier Terme lassen sich einfach berechnen:

$$\int \psi(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2) \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} \right\} \psi(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2)\, d\tau_1\, d\tau_2$$
$$= Z'^2 - 2ZZ'.$$

Das Integral mit $1/r_{12}$ wird zweckmäßig durch Einführung elliptischer Koordinaten berechnet:

$$s = r_1 + r_2, \quad t = r_1 - r_2, \quad u = r_{12},$$
$$d\tau_1\, d\tau_2 = \pi^2(s^2 - t^2)\, u\, ds\, dt\, du,$$
$$-u \leqq t \leqq u, \quad 0 \leqq u \leqq s \leqq \infty.$$

Es folgt

$$\int \psi^2(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2) \frac{1}{r_{12}}\, d\tau_1\, d\tau_2$$
$$= \pi^2 c^2 \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_{-u}^{+u} dt\, \mathrm{e}^{-2Z's} \frac{s^2 - t^2}{u}\, u = \frac{5}{8} Z'.$$

Schließlich erhalten wir

$$E(Z') = Z'^2 - 2ZZ' + \frac{5}{8} Z'.$$

$E(Z')$ besitzt für

$$Z' = Z - \frac{5}{16}$$

ein Minimum. Für diesen Wert von Z' ist die Energie des Grundzustandes

$$E = -\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2.$$

Um eine Vorstellung von der Genauigkeit der Rechnungen zu erhalten, bestimmen wir das Ionisationspotential des Heliums ($Z = 2$) und vergleichen das Ergebnis mit den experimentellen Daten. Das Ionisationspotential I_{He} des Heliums ist gleich der Differenz zwischen der Energie des einfach ionisierten Heliumatoms und des neutralen Heliumatoms im Grundzustand. Wir finden

$$I_{\text{He}} = 0{,}8476 \text{ at. Einh.} = 1{,}695\, Ry = 22{,}9 \text{ eV}$$

(eine atomare Energieeinheit ist gleich $2\, Ry = 27$ eV). Der experimentelle Wert beträgt $I_{\text{He}} = 1{,}810\, Ry$.

Die Ionisationspotentiale weiterer Zweielektronensysteme wie Li^+ und Be^{2+} sind ebenfalls experimentell bekannt. In der Tabelle werden sie mit den berechneten Werten verglichen.

Element	He ($Z=2$)	Li^+ ($Z=3$)	Be^{2+} ($Z=4$)	B^{3+} ($Z=5$)	C^{4+} ($Z=6$)
I_{ber} [Ry]	1,6952	5,445	11,195	18,945	28,695
I_{exp} [Ry]	1,810	5,560	11,307	19,061	28,816

Die berechneten Energien der Grundzustände stimmen befriedigend mit den experimentellen Energien überein.

7.15. Bahndrehimpuls und Spin des Heliumatoms im Grundzustand sind gleich Null. Daher besitzt das Helium diamagnetische Eigenschaften. Die auf ein Grammatom bezogene diamagnetische Suszeptibilität ist durch

$$\chi = -\frac{e^2 N_A}{6\mu\, c^2}(\overline{r_1^2} + \overline{r_2^2})$$

definiert, wobei

$$\overline{r_1^2} + \overline{r_2^2} = \int (r_1^2 + r_2^2)\, \psi^2\, d\tau_1\, d\tau_2$$

ist (N_A ist die LOSCHMIDTsche Zahl). Die Wellenfunktion des Grundzustandes des Heliumatoms ist näherungsweise gegeben durch

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{Z'^3}{\pi a^3}\, e^{-Z'(r_1+r_2)/a}.$$

Berechnet man den Mittelwert $\overline{r_1^2} + \overline{r_2^2}$ mit Hilfe dieser Funktion, so erhält man

$$\overline{r_1^2} + \overline{r_2^2} = \frac{2a^2}{Z'^2}.$$

Durch Einsetzen dieses Wertes in den Ausdruck für die diamagnetische Suszeptibilität folgt

$$\chi = -1{,}67 \cdot 10^{-6}.$$

Der experimentelle Wert der diamagnetischen Suszeptibilität beträgt

$$\chi = -(1{,}90 \pm 0{,}02) \cdot 10^{-6}.$$

7.16. Wir führen zweckmäßigerweise die folgenden Bezeichnungen ein:

$$Z_1 = \alpha, \quad Z_2 = 2\beta, \quad 2Z_1^{3/2} = a, \quad cZ_2^{3/2} = b.$$

Aus der Orthonormalitätsbedingung folgt

$$\gamma Z_2 = \frac{1}{2}(\alpha + \beta), \quad b^2 = \frac{12\beta^5}{\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2}.$$

Mit den neuen Bezeichnungen haben wir für ψ_1 und ψ_2

$$\psi_1 = \psi_{100} = a\,\mathrm{e}^{-\alpha r}\, Y_{00},$$

$$\psi_2 = \psi_{200} = b[1 - \frac{1}{3}(\alpha + \beta)\, r]\,\mathrm{e}^{-\beta r}\, Y_{00}.$$

Die genäherte Wellenfunktion des Lithiumatoms im Grundzustand kann in der Form

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1)\,\eta_+(\sigma_1) & \psi_1(2)\,\eta_+(\sigma_2) & \psi_1(3)\,\eta_+(\sigma_3) \\ \psi_1(1)\,\eta_-(\sigma_1) & \psi_1(2)\,\eta_-(\sigma_2) & \psi_1(3)\,\eta_-(\sigma_3) \\ \psi_2(1)\,\eta_+(\sigma_1) & \psi_2(2)\,\eta_+(\sigma_2) & \psi_2(3)\,\eta_+(\sigma_3) \end{vmatrix}$$

mit

$$\eta_+(\tfrac{1}{2}) = 1, \quad \eta_+(-\tfrac{1}{2}) = 0, \quad \eta_-(\tfrac{1}{2}) = 0, \quad \eta_-(-\tfrac{1}{2}) = 1$$

dargestellt werden. In diesem Zustand gilt $S = \frac{1}{2}$, $M = \frac{1}{2}$.

Der HAMILTON-Operator lautet im betrachteten Fall (in atomaren Einheiten $e = \hbar = \mu = 1$)

$$H = \sum_{i=1}^{3} \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_i - \frac{Z}{r_i} \right\} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{23}} + \frac{1}{r_{31}}.$$

Wir berechnen die Energie im Zustand Φ.

Die kinetische Energie eines Elektrons beträgt im $1s$-Zustand

$$T_1 = \int \left\{ -\psi_1 \frac{1}{2}\Delta\psi_1 \right\} d\tau = \int_0^\infty \left(\frac{d\psi_1}{dr} \right)^2 r^2\, dr = \frac{1}{2}\alpha^2$$

und im $2s$-Zustand

$$T_2 = \frac{\beta^2}{6} + \frac{\beta^4}{\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2}.$$

Die Wechselwirkungsenergie zwischen den inneren bzw. äußeren Elektronen und dem Kern beträgt

$$U_1 = -\int \frac{Z\psi_1^2}{r}\, d\tau = -Za^2 \int_0^\infty \frac{e^{-2\alpha r}}{r}\, r^2\, dr = -Z\alpha$$

bzw.

$$U_2 = -\frac{Z\beta}{2} + \frac{Z\beta^2}{2}\,\frac{\alpha - 2\beta}{\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2} \quad \text{(für Lithium ist } Z = 3\text{)}.$$

Die Energie der COULOMB-Wechselwirkung der inneren Elektronen ist

$$K_{11} = \iint \frac{1}{r_{12}}\, |\psi_1(\mathfrak{r}_1)|^2\, |\psi_1(\mathfrak{r}_2)|^2\, d\tau_1\, d\tau_2 = \frac{5}{8}\alpha.$$

Die Wechselwirkungsenergie zwischen den inneren und den äußeren Elektronen ist

$$2K_{12} = 2\iint \frac{1}{r_{12}}\, |\psi_1(\mathfrak{r}_1)|^2\, |\psi_2(\mathfrak{r}_2)|^2\, d\tau_1\, d\tau_2$$
$$= 2\alpha - \frac{2\alpha^3}{(\alpha + \beta)^2} - \frac{\alpha^4\beta(3\alpha + \beta)}{(\alpha + \beta)^3\,(\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2)}.$$

Die Austauschenergie beträgt für zwei Elektronen mit parallelen Spins

$$A = 2a^2\, b^2 \int_0^\infty e^{-(\alpha+\beta)r_2} \left[1 - \frac{1}{3}(\alpha + \beta)\, r_2\right] r_2^2\, dr_2$$
$$\times \int_{r_2}^\infty e^{-(\alpha+\beta)r_1} \left[1 - \frac{1}{3}(\alpha + \beta)\, r_1\right] r_1\, dr_1$$
$$= \frac{4\alpha^3\, \beta^5}{(\alpha + \beta)^5\,(\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2)}.$$

Für $\beta = \lambda\alpha$ erhalten wir

$$2T_1 + T_2 = T = \alpha^2\varphi_1(\lambda),$$

$$2U_1 + U_2 + K_{11} + 2K_{12} - A = -\alpha\varphi_2(\lambda),$$

$$E = \alpha^2\varphi_1(\lambda) - \alpha\varphi_2(\lambda).$$

Die Energie nimmt für diejenigen Werte von α und λ, die den Bedingungen

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0,$$

d. h.

$$2\alpha\, \varphi_1(\lambda) - \varphi_2(\lambda) = 0, \quad \alpha\varphi_1'(\lambda) - \varphi_2'(\lambda) = 0$$

genügen, ein Minimum an. Durch Elimination von α erhalten wir

$$\frac{\varphi_1'(\lambda)}{\varphi_1(\lambda)} - \frac{2\varphi_2'(\lambda)}{\varphi_2(\lambda)} = 0, \quad \lambda = 0{,}2846.$$

Die entsprechenden Werte von α und β sind

$$\alpha = 2{,}694, \quad \beta = 0{,}767.$$

Setzen wir die ermittelten Größen der Variationsparameter in E ein, so erhalten wir für die Energie im Grundzustand des Lithiumatoms

$$E = -7{,}414 \text{ at. Einh.} = -200{,}8 \text{ eV}.$$

Der experimentelle Wert beträgt $E_{\text{exp}} = -202{,}54$ eV.

Wenden wir die Störungstheorie an, d. h., setzen wir $\alpha = 3$, $\beta = {}^3/_2$, so erhalten wir für die Energie des Grundzustandes einen weniger genauen Wert als nach der Variationsmethode:

$$E = -7{,}05 \text{ at. Einh.} = -190{,}84 \text{ eV}.$$

7.17. Wir betrachten den Operator T der kinetischen Energie des Kernes. Im Massenmittelpunktsystem

$$\mathfrak{P} + \sum \mathfrak{p}_i = 0$$

($\mathfrak{P}$ ist der Impuls des Kerns, $\mathfrak{p}_i$ sind die Impulse der Elektronen) hat T die Form

$$T = \frac{\mathfrak{P}^2}{2M} = \frac{(\sum \mathfrak{p}_i)^2}{2M} = \sum \frac{\mathfrak{p}_i^2}{2M} + \sum_{i>k} \frac{\mathfrak{p}_i\mathfrak{p}_k}{M}.$$

Da für das Verhältnis der Elektronenmasse zur Kernmasse $m/M \ll 1$ gilt, kann die Verschiebung nach der Störungstheorie berechnet werden:

$$\Delta E = \int \psi^* T \psi \, d\tau.$$

Dabei ist ψ die Wellenfunktion der Elektronen im Feld des unendlich schweren ruhenden Kerns.

Der erste Term in der Formel für T unterscheidet sich nur durch den Faktor m/M von der kinetischen Energie der Elektronen, die nach dem Virialsatz gleich der Energie des Atoms mit umgekehrtem Vorzeichen ist. Daher kann ΔE als Summe zweier Ausdrücke dargestellt werden:

$$\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2,$$

$$\Delta E_1 = -\frac{m}{M} E, \quad \Delta E_2 = \frac{1}{M} \int \psi^* \sum_{i>k} \mathfrak{p}_i \mathfrak{p}_k \psi \, d\tau.$$

Wir untersuchen den Ausdruck für ΔE_2 genauer. Wählen wir ψ als Produkt der Wellenfunktionen der einzelnen Elektronen, so wird $\Delta E_2 = 0$, da der mittlere Impuls eines Elektrons im gebundenen Zustand immer verschwindet. Wird diese Wellenfunktion jedoch symmetrisiert, so ist ΔE_2 von Null verschieden. Wir schreiben die symmetrisierte Eigenfunktion des Heliumatoms in der Form

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(r_1)\, \psi_2(r_2) \pm \psi_1(r_2)\, \psi_2(r_1)],$$

wobei sich das obere Vorzeichen auf das Para-Helium (Gesamtspin $S = 0$) und das untere Vorzeichen auf das Ortho-Helium ($S = 1$) bezieht.

Setzen wir diesen Ausdruck in die Formel für ΔE_2 ein, so folgt

$$\Delta E_2 = \pm \frac{1}{M} \left| \int \psi_1^* \mathfrak{p} \psi_2 \, d\tau \right|^2.$$

Das Matrixelement des Impulses ist nur für $\Delta l = 0, \pm 1$ ungleich Null. Aus diesem Grunde verschwindet ΔE_2 für die Zustände $1snd$, $1snf$ usw.

Wählt man für das $1s$-Elektron und das np-Elektron die Wasserstoffeigenfunktionen mit den effektiven Ladungen Z_1 und Z_2:

$$\psi_{1s}(r) = \sqrt{\frac{Z_1^3}{\pi}}\, e^{-Z_1 r},$$

$$\psi_{np}(r) = Y_{10} \frac{2Z_2^2}{3} \frac{\sqrt{n^2 - 1}}{n^2} r\, e^{-Z_2 r/n} F\left(-n + 2, 4; \frac{2Z_2 r}{n}\right),$$

so erhält man

$$\Delta E_2 = \pm \frac{m}{M} \frac{64}{3} (Z_1 Z_2)^5 \frac{(Z_1 n - Z_2)^{2n-4}}{(Z_1 n + Z_2)^{2n+4}} n^3 (n^2 - 1),$$

wobei das obere Vorzeichen zum Para-Term $1snp\,^1P$ und das untere Vorzeichen zum Ortho-Term $1snp\,^3P$ gehört.

7.18. Es sei $\psi(x, y, z)$ eine zum diskreten Energiespektrum gehörige Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung. Wir betrachten die einparametrige Schar normierter Funktionen $\lambda^{3/2}\psi(\lambda x, \lambda y, \lambda z)$.

Der Ausdruck

$$I(\lambda) = \lambda^3 \int \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} |\nabla\psi(\lambda x, \lambda y, \lambda z)|^2 + U(x, y, z) |\psi(\lambda x, \lambda y, \lambda z)|^2 \right\} dx\, dy\, dz$$

besitzt als Funktion von λ ein Extremum bei $\lambda = 1$, d. h., es ist

$$\left(\frac{dI}{d\lambda}\right)_{\lambda=1} = 0.$$

Gehen wir zu den neuen Integrationsvariablen $\lambda x, \lambda y, \lambda z$ über, so folgt

$$I(\lambda) = \lambda^2 \overline{T} + \lambda^{-\nu} \overline{U}.$$

Daraus finden wir die Beziehung

$$2\overline{T} - \nu \overline{U} = 0.$$

Es ist nicht schwer, den Virialsatz auf den Fall eines aus vielen Teilchen bestehenden Systems zu verallgemeinern.

7.19. Man erhält

7.19.1. $Z^{-1/3} \dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$. *7.19.2.* $Z^{1/3} \dfrac{\mu e^4}{\hbar^2}$. *7.19.3.* $Z^{4/3} \dfrac{\mu e^4}{\hbar^2}$.

7.19.4. $Z^{7/3} \dfrac{\mu e^4}{\hbar^2}$. *7.19.5.* $Z^{2/3} \dfrac{e^2}{\hbar}$. *7.19.6.* $Z^{1/3}\hbar$. *7.19.7.* $Z^{1/3}$.

7.20. Die Gesamtenergie besteht aus drei Teilen: der kinetischen Energie der Elektronen T, der Wechselwirkungsenergie zwischen den Elektronen und dem Kern U_{ne} und der Wechselwirkungsenergie der Elektronen untereinander U_{ee}. Die beiden letzten Terme lauten

$$U_{\mathrm{ne}} = -\int \frac{Z}{r} \varrho\, d\tau, \qquad U_{\mathrm{ee}} = \frac{1}{2} \int \frac{\varrho(\mathfrak{r})\, \varrho(\mathfrak{r}')}{|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|} d\tau\, d\tau'.$$

Um die kinetische Energie zu berechnen, betrachten wir das infinitesimale Volumenelement $d\tau$ im Atom. Die Zahl der Elektronen mit Impulsen zwischen $\mathfrak{p}$ und $\mathfrak{p} + d\mathfrak{p}$ ist dem Phasenvolumen proportional und beträgt

$$dn = \frac{8\pi p^2\, dp\, d\tau}{(2\pi)^3} = \frac{p^2\, dp\, d\tau}{\pi^2}.$$

Die Elektronendichte ergibt sich durch Integration über p von 0 bis zu einem bestimmten Maximalwert $p = p_0$:

$$\varrho = \frac{p_0^3}{3\pi^2}.$$

Die kinetische Energie der im Volumen $d\tau$ befindlichen Elektronen ist

$$dT = \int_0^{p_0} \frac{p^2}{2}\, dn = \frac{p_0^5}{10\pi^2}\, d\tau.$$

Drückt man in dieser Beziehung p_0 durch ϱ aus und integriert über das Volumen des Atoms, so erhält man die kinetische Energie der Elektronen:

$$T = \frac{1}{10\pi^2} (3\pi^2)^{5/3} \int \varrho^{5/3}\, d\tau.$$

Schließlich folgt die Gesamtenergie

$$E = T + U_{\text{ne}} + U_{\text{ee}}$$
$$= \frac{(3\pi^2)^{5/3}}{10\pi^2} \int \varrho^{5/3}\, d\tau - Z \int \frac{\varrho}{r}\, d\tau + \frac{1}{2} \int\int \frac{\varrho(\mathfrak{r})\, \varrho(\mathfrak{r}')}{|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|}\, d\tau\, d\tau'.$$

7.22. Das Volumenelement lautet, durch x ausgedrückt,

$$d\tau = 4\pi\, r^2\, dr = 8\pi\, \lambda^3 x^5\, dx.$$

Wir berechnen die kinetische Energie

$$T = \frac{12(3\pi^2)^{5/3}}{25\pi} \lambda^3 A^{5/3}$$

und die Wechselwirkungsenergie zwischen den Elektronen und dem Kern

$$U_{\text{ne}} = -8\pi\, A\lambda^2 Z.$$

Zur Berechnung von

$$U_{\text{ee}} = \frac{1}{2} \int\int \frac{\varrho(\mathfrak{r})\, \varrho(\mathfrak{r}')}{|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|}\, d\tau\, d\tau'$$

ermitteln wir zunächst das durch die Elektronen erzeugte Potential φ_{e}. Durch Lösung der Poisson-Gleichung

$$\Delta\varphi_{\text{e}} = 4\pi\, \varrho$$

erhalten wir

$$\varphi_{\text{e}} = -\frac{16\pi\, A\lambda^2}{x^2} [1 - \mathrm{e}^{-x}(x + 1)].$$

Wir berechnen nun U_{ee} mit Hilfe des GREENschen Satzes und finden

$$U_{ee} = -\frac{1}{2}\int \varphi_e \varrho \, d\tau = 16\pi^2 A^2 \lambda^5 .$$

Aus der Normierungsbedingung ergibt sich A:

$$\int \varrho \, d\tau = 16\pi A \lambda^3 = N .$$

Setzen wir

$$A = \frac{N}{16\pi \lambda^3}$$

in die Ausdrücke für T, U_{ne}, U_{ee} ein, so folgt

$$T = \frac{12}{25\pi}\left(\frac{3\pi N}{16}\right)^{5/3} \frac{1}{\lambda^2},$$

$$U_{ne} = -\frac{ZN}{2\lambda},$$

$$U_{ee} = \frac{N^2}{16\lambda}.$$

Das Minimum von $E = T + U_{ne} + U_{ee}$ ergibt sich mit

$$\lambda = \frac{9}{25}\left(\frac{3\pi N}{16}\right)^{2/3} \frac{1}{Z - \frac{N}{8}}$$

zu

$$E = \frac{25}{36}\left(\frac{16}{3\pi}\right)^{2/3} N^{1/3}\left(Z - \frac{N}{8}\right)^2 \text{ [at. Einh.]}.$$

Für das neutrale Atom gilt

$$E = \frac{25 \cdot 49}{36 \cdot 64}\left(\frac{16}{3\pi}\right)^{2/3} Z^{7/3} = 0{,}758\, Z^{7/3} \text{ [at. Einh.]}.$$

7.23. Es sei $\varrho(\mathfrak{r})$ der Ausdruck für die Elektronendichte im THOMAS-FERMI-Modell. Für eine solche Funktion nimmt die Energie des Atoms

$$E = \frac{(3\pi^2)^{5/3}}{10\pi^2}\int \varrho^{5/3}\, d\tau - Z\int \frac{\varrho}{r}\, d\tau + \frac{1}{2}\iint \frac{\varrho(\mathfrak{r})\,\varrho(\mathfrak{r}')}{|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|}\, d\tau\, d\tau'$$

ein Minimum an.

Setzt man in diesen Ausdruck statt ϱ die Funktion $\lambda^3\varrho(\lambda\mathfrak{r})$ ein, die derselben Normierungsbedingung wie $\varrho(\mathfrak{r})$ genügt, so erhält man

$$E(\lambda) = \lambda^2 T + \lambda U,$$

wobei T die kinetische und U die potentielle Energie der Elektronen im Atom bedeuten. Da $E(\lambda)$ für $\lambda = 1$ ein Minimum besitzen muß, hat man die Gleichung

$$2T + U = 0,$$

die den Virialsatz ausdrückt.

7.24. Die Wechselwirkungsenergie der Elektronen kann in der Form

$$U_{\text{ee}} = -\frac{1}{2}\int \varphi_{\text{e}}\varrho \, d\tau = \frac{Z}{2}\int \frac{\varrho}{r}\, d\tau - \frac{1}{2}\int \varphi\varrho \, d\tau \tag{1}$$

geschrieben werden. Dabei sind φ_{e} das von den Elektronen erzeugte Potential und φ das Potential eines „self-consistent"-Feldes, welches das Kernfeld enthält:

$$\varphi = \varphi_{\text{e}} + \frac{Z}{r}.$$

Im THOMAS-FERMI-Modell gelten die Beziehungen

$$\frac{p_0^2}{2} = \varphi - \varphi_0, \quad \varrho = \frac{p_0^3}{3\pi^2},$$

wobei p_0 der Maximalimpuls und φ_0 das Potential am Rand des Atoms sind. Eliminiert man p_0 und drückt in der Formel (1) φ durch ϱ aus, so findet man

$$U_{\text{ee}} = \frac{Z}{2}\int \frac{\varrho}{r}\, d\tau - \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{4}\int \varrho^{5/3}\, d\tau - \frac{\varphi_0 N}{2}.$$

Die ersten beiden Terme unterscheiden sich nur durch die Faktoren von der Wechselwirkungsenergie zwischen den Elektronen und dem Kern

$$U_{\text{ne}} = -Z\int \frac{\varrho}{r}\, d\tau$$

und der kinetischen Energie

$$T = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10}\int \varrho^{5/3}\, d\tau.$$

Es gilt also

$$U_{ee} = -\frac{1}{2} U_{ne} - \frac{5}{6} T - \frac{\varphi_0 N}{2}.$$

Setzen wir den Wert von T nach dem Virialsatz ein:

$$2T = -U_{ne} - U_{ee},$$

so erhalten wir schließlich

$$U_{ee} = -\frac{1}{7} U_{ne} - \frac{6}{7} \varphi_0 N.$$

Für das neutrale Atom ($N = Z$) ist $\varphi_0 = 0$, und es gilt

$$U_{ee} = -\frac{1}{7} U_{ne}.$$

7.25. Die zur totalen Ionisierung notwendige Arbeit ist gleich der Gesamtenergie der Elektronen mit umgekehrtem Vorzeichen. Unter Benutzung des Virialsatzes folgt (vgl. die vorige Aufgabe):

$$E_{ion} = -\frac{3}{7} U_{ne} + \frac{3}{7} \varphi_0 N.$$

Wir formen den Ausdruck

$$U_{ne} = -Z \int \frac{\varrho}{r} \, d\tau$$

um, indem wir das von den Elektronen erzeugte Potential φ_e einführen:

$$\Delta \varphi_e = 4\pi \varrho,$$

und den GREENschen Satz benutzen:

$$U_{ne} = -\frac{Z}{4\pi} \int \frac{\Delta \varphi_e}{r} \, d\tau = Z\varphi_e(0).$$

(Das Oberflächenintegral an der Grenze des Atoms ist gleich Null, und es gilt $\Delta \, 1/r = -4\pi \, \delta(\mathfrak{r})$.)

Es ist somit

$$E_{ion} = -\frac{3}{7} Z\varphi_e(0) + \frac{3}{7} N\varphi_0.$$

Gehen wir zu den THOMAS-FERMI-Einheiten

$$r = xbZ^{-1/3}, \quad b = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3}, \quad \varphi - \varphi_0 = \frac{Z^{4/3}}{b}\frac{\chi(x)}{x}$$

über, so finden wir

$$\varphi_e(r) = \varphi - \frac{Z}{r} = \varphi_0 - \frac{Z^{4/3}}{b}[1 - \chi(x)],$$

und da für kleine x

$$\chi(x) = 1 - ax + \frac{4}{3}x^{3/2}$$

mit $a = a_0 = 1{,}58$ für das neutrale Atom (für das positive Ion gilt $a > a_0$) gilt, erhalten wir schließlich

$$E_{\text{ion}} = \frac{3}{7}\frac{Z^{7/3}}{b}a - \frac{3}{7}\frac{(Z-N)^2 Z^{1/3}}{bx_0},$$

wobei x_0 der Radius des $(Z - N)$-fach ionisierten Atoms ist.

7.26. Das Potential einer Kugel mit Oberflächenladung stimmt außerhalb der Kugel mit dem COULOMB-Potential einer Punktladung überein, wenn die Gesamtladung in beiden Fällen dieselbe ist. Innerhalb der Kugel ist die Differenz der beiden Potentiale

$$\Delta\varphi = -Ze\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a}\right).$$

Die Änderung der potentiellen Energie der Elektronen im Atom beträgt

$$\Delta U = -Ze^2 \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{a}\right)\varepsilon(r_i),$$

wobei

$$\varepsilon(r) = \begin{cases} 1 & \text{für} \quad r < a, \\ 0 & \text{für} \quad r > a \end{cases}$$

gilt. In erster Näherung der Störungstheorie erhalten wir die Verschiebung der Energieniveaus

$$\Delta E = -Ze^2 \int |\psi|^2 \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{a}\right)\varepsilon(r_i)\, d\tau_1 \cdot \ldots \cdot d\tau_N.$$

Integrieren wir über alle Variablen bis auf eine, so finden wir

$$\int |\psi(r_1, r_2, \ldots, r_N)|^2 \, d\tau_2 \cdot \ldots \cdot d\tau_N = \frac{1}{N} \varrho(r),$$

wobei $\varrho(r)$ die Elektronendichte bedeutet.

Es gilt also

$$\Delta E = -Ze^2 \int \varrho(r) \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right) \varepsilon(r) \, d\tau.$$

Mit Rücksicht auf die Tatsache, daß sich $\varrho(r)$ im Gebiet $r < a$ nur wenig ändert, nehmen wir diese Größe an der Stelle $r = 0$ und ziehen sie vor das Integralzeichen:

$$\Delta E = -Ze^2 \varrho(0) \frac{2\pi}{3} a^2 .$$

7.27. Die Wellenfunktion des s-Elektrons lautet

$$\psi_n(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi_n(r)}{r},$$

wobei χ_n der Gleichung

$$\chi_n'' + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E_n - U(r)] \chi_n = 0$$

und der Normierungsbedingung

$$\int_0^\infty \chi_n^2 \, dr = 1$$

genügt.

In der quasiklassischen Näherung erhalten wir die Lösung

$$\chi_n = \frac{A_n}{\sqrt{p_n}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_0^r p_n \, dr + \varphi \right) \tag{1}$$

mit

$$p_n = \sqrt{2\mu [E_n - U(r)]}.$$

Diese Lösung ist jedoch im Gebiet kleiner r nicht anwendbar. Tatsächlich kann man für kleine r, d. h.

$$r \ll \frac{\hbar^2}{Z^{1/3} \mu e^2},$$

erstens die Abschirmung des Kernfeldes vernachlässigen und $U(r) = -Ze^2/r$ setzen und zweitens auch E_n gegen $U(r)$ vernachlässigen. Setzt man $p = \sqrt{2\mu\, Ze^2/r}$ in die Bedingung für die Anwendbarkeit der quasiklassischen Näherung

$$\frac{d\left(\frac{\hbar}{p}\right)}{dr} \ll 1$$

ein, so ergibt sich

$$r \gg \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2}.$$

Um für χ_n einen Ausdruck zu erhalten, der im Gebiet kleiner r anwendbar ist, ersetzen wir in der Ausgangsgleichung $U(r)$ durch $-Ze^2/r$ und vernachlässigen E_n:

$$\chi_n'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{Ze^2}{r}\chi_n = 0.$$

Diese Gleichung besitzt die Lösung

$$\chi_n = C_n \sqrt{r}\, J_1\left(2\sqrt{\frac{2\mu\, Ze^2 r}{\hbar^2}}\right). \tag{2}$$

Um den Zusammenhang zwischen den Konstanten C_n und A_n zu finden, beachten wir, daß das Gebiet, in welchem die quasiklassische Näherung (1) anwendbar ist,

$$r \gg \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2},$$

und das Gebiet der Anwendbarkeit der Lösung (2), welche die Abschirmung des Kernfeldes vernachlässigt,

$$r \ll \frac{\hbar^2}{Z^{1/3}\mu e^2},$$

sich für große Z überdecken und aus diesem Grunde die Lösungen (1) und (2) für $\hbar^2/Z\mu e^2 \ll r \ll \hbar^2/Z^{1/3}\mu e^2$ identisch sein müssen.

Wir zeigen nun, daß die Lösungen (1) und (2) im gesamten Gebiet, in dem sie anwendbar sind, dieselbe Form besitzen. Dazu setzen wir in (1) $p = \sqrt{2\mu Ze^2/r}$

und erhalten

$$\chi_n = \frac{A_n \sqrt[4]{r}}{\sqrt[4]{2\mu\, Ze^2}} \cos\left(\frac{2\sqrt{2\mu\, Ze^2 r}}{\hbar} + \varphi\right), \qquad \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2} \ll r \ll \frac{\hbar^2}{Z^{1/3}\mu e^2}. \tag{3}$$

Die Bedingung

$$r \gg \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2}$$

bedeutet, daß das Argument der BESSEL-Funktion in (2) groß ist. Für große Argumente ($x \gg 1$) gilt aber

$$J_1(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{3\pi}{4}\right).$$

Damit erhalten wir die Lösung (2) in der Form

$$\chi_n = C_n \sqrt{r} \sqrt{\frac{\hbar}{\pi\sqrt{2\mu\, Ze^2 r}}} \cos\left(\frac{2\sqrt{2\mu\, Ze^2 r}}{\hbar^2} - \frac{3\pi}{4}\right),$$

$$\frac{\hbar^2}{Z\mu e^2} \ll r \ll \frac{\hbar^2}{Z^{1/3}\mu e^2}.$$

Vergleichen wir diese Beziehung mit (3), so finden wir

$$\varphi = -\frac{3\pi}{4}, \quad A_n = C_n \sqrt{\frac{\hbar}{\pi}}.$$

Wir können nun $\psi^2(0)$ bestimmen. Für $x \ll 1$ gilt

$$J_1(x) = \frac{x}{2},$$

und mit Hilfe der Formel (2) folgt

$$\left.\frac{\chi_n}{r}\right|_{r\to 0} = C_n \sqrt{\frac{2\mu\, Ze^2}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2\pi\, \mu Ze^2}{\hbar^3}}\, A_n.$$

Wir erhalten

$$\psi_n^2(0) = \frac{\mu Ze^2}{2\hbar^3} A_n^2.$$

Die Konstante A_n ergibt sich aus der Normierungsbedingung

$$\int_0^\infty \chi_n^2\, dr = A_n^2 \int_0^\infty \frac{\cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_0^r p_n\, dr - \frac{3\pi}{4}\right)}{\sqrt{2\mu[E_n - U(r)]}}\, dr$$

$$\approx \frac{A_n^2}{2} \int_0^\infty \frac{dr}{\sqrt{2\mu[E_n - U(r)]}} = 1 .$$

Differenzieren wir die Quantenbedingung

$$\int \sqrt{2\mu[E_n - U(r)]}\, dr = \pi(n + \gamma)\, \hbar ,$$

welche E_n als Funktion von n definiert, nach n, so folgt

$$\mu \frac{dE_n}{dn} \int \frac{dr}{\sqrt{2\mu[E_n - U(r)]}} = \pi\hbar .$$

Vergleichen wir den letzten Ausdruck mit der Normierungsbedingung, so erhalten wir

$$A_n^2 = \frac{2\mu}{\pi\hbar} \frac{dE_n}{dn}$$

und schließlich

$$\psi_n^2(0) = \frac{Ze^2\mu^2}{\pi\hbar^4} \frac{dE_n}{dn}. \tag{4}$$

Für das nichtabgeschirmte COULOMB-Feld gilt

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \frac{\mu e^4}{\hbar^2},$$

und die aus der Beziehung (4) bestimmte Größe

$$\psi_n^2(0) = \frac{Z^3}{\pi n^3} \left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^3$$

stimmt mit der aus der exakten Rechnung gewonnenen Größe überein. In der Atomspektroskopie wird häufig für die Energieniveaus angeregter Zustände des Valenzelektrons die Formel

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(n - \sigma)^2}$$

benutzt, wobei σ die schwach von n abhängige RYDBERG-Korrektion ist. Mit dieser Formel für E_n erhält man

$$\psi^2(0) = \frac{Z}{\pi}\,\frac{\mu^3 e^6}{\hbar^6}\,\frac{\left(1 - \dfrac{d\sigma}{dn}\right)}{(n-\sigma)^3}.$$

7.28. Das Elektron befinde sich in einem stationären Zustand mit der magnetischen Quantenzahl m. Die Wellenfunktion dieses Zustandes lautet

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)\, P_l^{(m)}(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi}.$$

Die elektrische Stromdichte im Zustand ψ_{nlm} beträgt in Polarkoordinaten

$$J_r = J_\vartheta = 0, \quad J_\varphi = -\frac{|e|\,\hbar m}{\mu r \sin\vartheta}\,|\psi_{nlm}|^2.$$

Wie man sieht, besitzt der Vektor der magnetischen Feldstärke die Richtung der z-Achse. Der Kreisstrom dJ erzeugt im Punkt 0 (Abb. 28) ein Magnetfeld mit der Feldstärke

$$dH_z = \frac{dJ}{rc}\,2\pi\sin^2\vartheta.$$

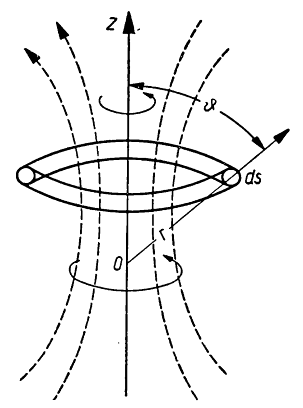


Abb. 28

Mit $dJ = J_\varphi\, r\, d\vartheta\, dr$ folgt

$$H_z = -\frac{2\pi\,|e|\,\hbar m}{\mu c}\int_0^\infty \frac{R^2}{r}\,dr \int_0^\pi |P_l^{(m)}|^2 \sin\vartheta\, d\vartheta = -\frac{m\,|e|\,\hbar}{\mu c}\int_0^\infty \frac{R^2}{r}\,dr.$$

Dieses Resultat kann auch anders gewonnen werden. Wie aus der Elektrodynamik bekannt ist, beträgt die durch eine bewegte Ladung erzeugte ma-

gnetische Feldstärke (Retardierungseffekte werden hier nicht berücksichtigt)

$$\mathfrak{H} = \frac{e}{\mu c} \frac{1}{r^3} (\mathfrak{r} \times \mathfrak{p}) = \frac{e}{\mu c} \frac{1}{r^3} \mathfrak{l},$$

wobei $\mathfrak{r}$ der Radiusvektor zum Beobachtungspunkt und $\mathfrak{l}$ der Drehimpuls sind.

In der Quantentheorie müssen wir zur Bestimmung des Mittelwertes der magnetischen Feldstärke das Integral

$$\overline{H_z} = -\frac{|e|\,\hbar}{\mu c} \int \psi^* \frac{l_z}{r^3} \psi \, d\tau$$

berechnen. Wegen $l_z\psi = m\psi$ erhalten wir

$$\overline{H_z} = -m \frac{|e|\,\hbar}{\mu c} \overline{\left(\frac{1}{r^3}\right)} = -m \frac{|e|\,\hbar}{\mu c} \left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^3 \frac{1}{n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)}.$$

Die Mittelwerte von H_x, H_y sind im betrachteten Falle gleich Null wegen

$$\int \psi^*_{nlm} l_y \psi_{nlm} \, d\tau = \int \psi^*_{nlm} l_x \psi_{nlm} \, d\tau = 0.$$

Für den $2p$-Zustand $(m = 1)$ ergibt sich

$$\overline{H_z} = -\frac{1}{12} \frac{|e|\,\hbar}{2\mu\, c} \left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^3, \quad \text{d. h.} \quad \overline{H_z} \approx 10^4 \text{ Gauß}.$$

7.29. Das magnetische Moment eines Teilchens ist

$$\mathfrak{M} = \frac{e}{2\mu c} \int \psi^* \mathfrak{l} \psi \, d\tau.$$

Für den Fall zweier Teilchen führen wir neue Variable ein, und zwar die Koordinaten des Massenmittelpunktes X, Y, Z und die Relativkoordinaten x, y, z des gegenseitigen Abstandes.

Der Mittelwert des magnetischen Momentes ist in den neuen Variablen

$$\overline{M_z} = \frac{e}{2c} \int \psi^* \left\{ \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \left(X \frac{\partial}{\partial y} - Y \frac{\partial}{\partial x}\right) \right.$$

$$\left. + \frac{1}{m + M} \left(x \frac{\partial}{\partial Y} - y \frac{\partial}{\partial X}\right) + \frac{m - M}{mM} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right) \right\} \psi \, d\tau.$$

Analoge Ausdrücke erhält man für $\overline{M_x}$ und $\overline{M_y}$.

Im stationären Zustand sind die Mittelwerte der Koordinaten x, y, z und der Impulse $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, $-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$, $-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$ gleich Null. Infolgedessen vereinfacht sich der letzte Ausdruck zu

$$\overline{M_z} = -\frac{e}{2mc}\left(1 - \frac{m}{M}\right)\int \psi^* \left\{-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right\}\psi\, d\tau.$$

In dieser Aufgabe bedeuten m die Elektronenmasse und M die Kernmasse.

7.30. Man erhält

$$\Delta E = 0{,}00844 \cdot 2{,}79\, Z^3/n^3\ [\mathrm{cm}^{-1}].$$

Für den Grundzustand des Wasserstoffatoms ($Z = n = 1$) ergibt sich

$$\Delta E = 0{,}0235\ [\mathrm{cm}^{-1}].$$

7.31. Um die Energie bestimmen zu können, muß man die vom Elektron erzeugte magnetische Feldstärke berechnen. Am Ort des Kerns erzeugt das Elektron infolge seiner Bahnbewegung nach dem BIOT-SAVARTschen Gesetz die magnetische Feldstärke

$$\mathfrak{H}_l = \frac{1}{c}\frac{\mathfrak{r} \times \mathfrak{j}}{r^3},$$

wobei $\mathfrak{r}$ den Radiusvektor vom Kern zum Elektron bedeutet und $\mathfrak{j} = -e\mathfrak{v}$ gilt ($-e$ ist die Ladung des Elektrons). Wir führen den Operator des Bahndrehimpulses $\mathfrak{l}$ ein und erhalten

$$\mathfrak{H}_l = -\frac{e\hbar}{\mu c}\frac{1}{r^3}\mathfrak{l}.$$

Da das Elektron auch ein magnetisches Spinmoment besitzt, beträgt die gesamte magnetische Feldstärke am Ort des Kerns

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_s + \mathfrak{H}_l = \frac{e\hbar}{\mu c r^3}\left\{\mathfrak{s} - \frac{3(\mathfrak{r}\mathfrak{s})\,\mathfrak{r}}{r^2} - \mathfrak{l}\right\}.$$

Daher können wir den für die Hyperfeinstruktur maßgeblichen Operator in der Form

$$w = -\beta\mathfrak{i}\mathfrak{H}$$

darstellen, wobei $\mathfrak{i}$ den Operator des Kernspins und $\beta\mathfrak{i}$ das magnetische Moment bedeuten. Wir betrachten w als kleine Störung. Der ungestörte Zustand wird durch die Quantenzahlen n, j ($j = l + {}^1/_2, j = l - {}^1/_2$) und l charakterisiert (es wird LS-Kopplung vorausgesetzt).

Zur Bestimmung der Hyperfeinstrukturenergie bilden wir den Mittelwert des Operators w im Zustand mit den Quantenzahlen

$$f, j, l \quad (\mathfrak{f} = \mathfrak{j} + \mathfrak{i}).$$

Auf Grund der Beziehung

$$(\mathfrak{A})_{fm}^{fm'} = \frac{(\mathfrak{f}\mathfrak{A})_f^f}{f(f+1)} (\mathfrak{f})_{fm}^{fm'}$$

erhalten wir

$$(\mathfrak{H})_{nljm_j}^{nljm_j'} = -\frac{e\hbar}{\mu c}\left(\frac{1}{r^3}\right)_{nljm_j}^{nljm_j} \frac{l(l+1)}{j(j+1)} (\mathfrak{j})_{jm_j}^{jm_j'}.$$

Mit Berücksichtigung dieser Formel zeigt man leicht, daß sich der Operator w in der Form

$$w = \frac{e\hbar}{\mu c} \beta \frac{1}{r^3} \frac{l(l+1)}{j(j+1)} (\mathfrak{i}\mathfrak{j})$$

darstellen läßt. Daraus folgt, daß die Hyperfeinstrukturenergie durch

$$E = \frac{e\hbar}{2\mu\, c} \beta \overline{\left(\frac{1}{r^3}\right)} \frac{l(l+1)}{j(j+1)} \{f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)\}$$

gegeben ist. Bei Berücksichtigung der Hyperfeinstruktur wird also jeder Term, der durch die Quantenzahlen n, l, j charakterisiert ist, in $2i + 1$ Komponenten aufgespalten (falls $j > i$ ist). Die Intervallregel für die Hyperfeinmultiplettstruktur wird durch die verschiedenen Werte von f bestimmt.

Wir bemerken, daß man durch einfache Berechnung der Zahl der Hyperfeinstrukturkomponenten im Spektrum eines gegebenen Nuklides den Kernspin bestimmen kann. Abb. 29 zeigt die Hyperfeinmultiplettstruktur der D-Linien des Natriums.

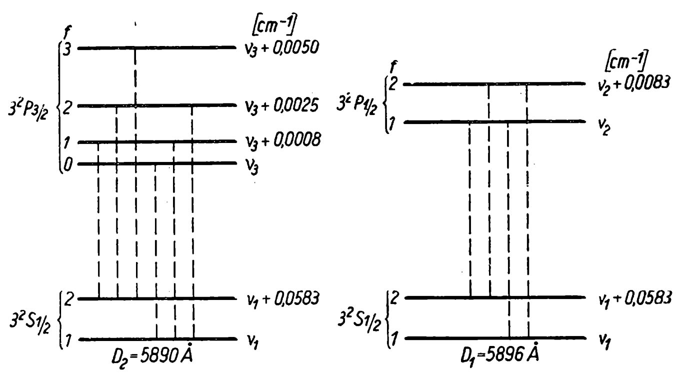


Abb. 29

Die Feinstruktur, d. h. das Vorhandensein des Dubletts (der Linie $D_1 = 5896$ Å, die dem Übergang $3^2P_{3/2} \to 3^2S_{1/2}$ entspricht, und der Linie $D_2 = 5890$ Å, die dem Übergang $3^2P_{1/2} \to 3^2S_{1/2}$ entspricht), wird durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung hervorgerufen (vgl. Aufgabe 7.10.).

7.32. In diamagnetischen Atomen ist nicht nur der Gesamtdrehimpuls, sondern auch der resultierende Bahndrehimpuls und der resultierende Spin der Elektronen einzeln gleich Null. Infolge seiner Präzession gewinnt das Elektron die zusätzliche Geschwindigkeit

$$\mathfrak{v}' = \frac{e}{2\mu c}\mathfrak{H} \times \mathfrak{r}.$$

Mit Hilfe des Vektorpotentials $\mathfrak{A}$ des äußeren Magnetfeldes, $\mathfrak{A} = {}^1/_2\mathfrak{H} \times \mathfrak{r}$, läßt sich die Beziehung schreiben

$$\mathfrak{v}' = \frac{e}{\mu c}\mathfrak{A}.$$

Die infolge der Präzession der Elektronenhülle entstehende Stromdichte ist

$$\mathfrak{J} = \frac{e}{\mu c}\mathfrak{A}\varrho(\mathfrak{r}),$$

wobei $\varrho(\mathfrak{r})$ die Ladungsdichte im Punkt $\mathfrak{r}$ bedeutet ($-e$ ist die Ladung des Elektrons).

Zunächst bestimmen wir das Vektorpotential $\mathfrak{A}'$ des induzierten Magnetfeldes:

$$\mathfrak{A}'(\mathfrak{r}) = \frac{e}{2\mu c^2}\int \mathfrak{H} \times \mathfrak{r}' \frac{\varrho(\mathfrak{r}')}{|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|}\,d\tau'.$$

Mit

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{\sqrt{R^2 + r^2 - 2Rr\{\cos\Theta\cos\vartheta + \sin\Theta\sin\vartheta\cos(\Phi - \varphi)\}}}$$

$$= \sum_{l,m}\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\,\frac{Y_{lm}^*(\Theta,\Phi)\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi)}{Y_{l0}(0)}\begin{cases}\dfrac{r^l}{R^{l+1}} & \text{für } r < R\\[2ex] \dfrac{R^l}{r^{l+1}} & \text{für } R < r\end{cases}$$

erhalten wir

$$\mathfrak{A}'(\mathfrak{r}) = \frac{e}{6\mu c^2}(\mathfrak{H} \times \mathfrak{r})\left\{\frac{1}{r^3}\int_{r'<r} r'^2\varrho(r')\,d\tau' + \int_{r'>r}\frac{\varrho(r')}{r'}\,d\tau'\right\}.$$

Mit Hilfe dieses Ausdruckes läßt sich die magnetische Feldstärke in z-Richtung einfach berechnen:

$$H_z' = \left(\frac{eH}{2\mu\, c^2 r^5}\right)\left(z^2 - \frac{1}{3} r^2\right) \int_{r'<r} r'^2 \varrho(r')\, d\tau' + \frac{eH}{3\mu\, c^2} \int_{r'>r} \frac{\varrho(r')}{r'}\, d\tau'.$$

Das im Mittelpunkt des Atoms induzierte Feld

$$H_z'(0) = \frac{eH}{3\mu\, c^2} \int \frac{\varrho(r')}{r'}\, d\tau' = \frac{eH}{3\mu\, c^2}\, \varphi(0),$$

das auf den Kern wirkt, hängt von dem durch die Elektronen erzeugten elektrostatischen Potential $\varphi(0)$ ab.

Im THOMAS-FERMI-Modell gilt

$$\varphi(0) = -1{,}588 \frac{Ze}{b} \quad \text{mit} \quad b = 0{,}858 \frac{a}{Z^{1/3}}, \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}.$$

Damit folgt

$$H_z'(0) = -0{,}319 \cdot 10^{-4}\, Z^{4/3} H.$$

7.33.

$$H_z'(0) = -\frac{27}{24} \frac{e^2 H}{\mu c^2 a} = -0{,}599 \cdot 10^{-4}\, H.$$

7.34. ${}^1S_0$, ${}^3S_1$, ${}^3P_{0,1,2}$, ${}^2D_{3/2,5/2}$, ${}^4D_{1/2,3/2,5/2,7/2}$.

7.35.

7.35.1. ${}^1S_0\ {}^3S_1$. *7.35.2.* ${}^1P_1\ {}^3P_{012}$. *7.35.3.* ${}^1D_2\ {}^3D_{123}$.

7.35.4. ${}^1S_0\ {}^3S_1\ {}^1P_1$, ${}^3P_{012}\ {}^1D_2\ {}^3D_{123}$.

7.36.

7.36.1. ${}^4S\ {}^2P\ {}^2D$. *7.36.2.* ${}^1S\ {}^3P\ {}^1D\ {}^3F\ {}^1G$. *7.36.3.* ${}^2S\ {}^2P\ {}^4P\ {}^2D$.

7.37.

O: ${}^3P_2$, Cl: ${}^2P_{3/2}$, Fe: ${}^5D_4$, Co: ${}^4F_{3/2}$, As: ${}^4S_{3/2}$, La: ${}^2D_{3/2}$.

7.38. Man erhält für K, Zn, C und O gerade Parität und für B, N und Cl ungerade Parität.

7.39. Sind alle drei Quantenzahlen voneinander verschieden, so ist die Zahl der Zustände gleich der Zahl der Kombinationen von N über $\frac{N}{2} + M_s$:

$$g(M_s) = C_N^{\frac{1}{2}N+M_s}.$$

Gibt es N' Paare, für die die Quantenzahlen n, l, m_l gleich sind, so gilt

$$g(M_s) = C_{N-2N'}^{\frac{1}{2}(N-2N')+M_s}.$$

7.40. Die Zahl der Zustände ist gleich

$$\frac{N_l(N_l - 1) \cdot \ldots \cdot (N_l - x + 1)}{x!} \quad \text{mit} \quad N_l = 2(2l + 1).$$

7.42. Für die antisymmetrische Wellenfunktion

$$\Phi = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \psi_{n^1 l^1 m_l^1 m_s^1}(\xi_1) & \psi_{n^1 l^1 m_l^1 m_s^1}(\xi_2) & & \psi_{n^1 l^1 m_l^1 m_s^1}(\xi_N) \\ \psi_{n^2 l^2 m_l^2 m_s^2}(\xi_1) & \psi_{n^2 l^2 m_l^2 m_s^2}(\xi_2) & & \psi_{n^2 l^2 m_l^2 m_s^2}(\xi_N) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \psi_{n^N l^N m_l^N m_s^N}(\xi_1) & \psi_{n^N l^N m_l^N m_s^N}(\xi_2) & \ldots & \psi_{n^N l^N m_l^N m_s^N}(\xi_N) \end{vmatrix},$$

die aus den Wellenfunktionen des Einelektronenproblems aufgebaut ist, schreiben wir abkürzend

$$\Phi(n^1 l^1 m_l^1 m_s^1, n^2 l^2 m_l^2 m_s^2, \ldots, n^N l^N m_l^N m_s^N).$$

Wir untersuchen die Wirkung des symmetrischen Operators

$$L_x - iL_y = \sum_{j=1}^{N} (l_x^j - il_y^j)$$

auf die antisymmetrische Funktion

$$\Phi(n^1 l^1 m_l^1 m_s^1, n^2 l^2 m_l^2 m_s^2, \ldots, n^N l^N m_l^N m_s^N).$$

Wie man leicht sieht, gilt

$$(L_x - iL_y)\,\Phi(n^1 l^1 m_l^1 m_s^1, n^2 l^2 m_l^2 m_s^2, \ldots)$$

$$= \sqrt{(l^1 + m_l^1)(l^1 - m_l^1 + 1)}\,\Phi(n^1 l^1 m_l^1 - 1 m_s^1, n^2 l^2 m_l^2 m_s^2, \ldots)$$

$$+ \sqrt{(l^2 + m_l^2)(l^2 - m_l^2 + 1)}\,\Phi(n^1 l^1 m_l^1 m_s^1, n^2 l^2 m_l^2 - 1 m_s^2, \ldots) + \ldots$$

$$+ \sqrt{(l^N + m_l^N)(l^N - m_l^N + 1)}\,\Phi(n^1 l^1 m_l^1 m_s^1, \ldots, n^N l^N m_l^N - 1 m_s^N).$$

Der Operator $S_x - iS_y$ hat analoge Eigenschaften; nur wird m_s statt m_l um 1 verringert.

Ist die Wellenfunktion Eigenfunktion der vier miteinander vertauschbaren Operatoren $\mathfrak{S}^2$, $\mathfrak{L}^2$, S_z, L_z, so reduziert sich die Wirkung der Operatoren $L_x - iL_y$ und $S_x - iS_y$ auf

$$\left.\begin{aligned}&(L_x - iL_y)\,\Phi(SLM_SM_L)\\&\qquad = \sqrt{(L + M_L)(L - M_L + 1)}\,\Phi(SLM_SM_L - 1),\\&(S_x - iS_y)\,\Phi(SLM_SM_L)\\&\qquad = \sqrt{(S + M_S)(S - M_S + 1)}\,\Phi(SLM_S - 1M_L).\end{aligned}\right\} \quad (1)$$

Nach diesen Vorbemerkungen gehen wir zur Lösung des Problems über.

Im betrachteten Fall haben wir es mit äquivalenten Elektronen zu tun. Daher können wir die Quantenzahlen n, l überall fortlassen. Gelegentlich werden wir den Wert der z-Komponente des Spins durch die Indizes $\pm$ an m_l kennzeichnen.

Für die Konfiguration p^3 klassifizieren wir die Zustände nach M_S und M_L, wobei wir uns auf nichtnegative Zahlen beschränken, und erhalten für die einzelnen Fälle die Terme

M_S	M_L			
$^3/_2$	0	$\Phi(1^+, -1^+, 0^+)$	Φ_1	$[^4S]$
$^1/_2$	0	$\Phi(1^+, -1^+, 0^-)$ $\Phi(1^-, -1^+, 0^+)$ $\Phi(1^+, -1^-, 0^+)$	Φ_2 Φ_3 Φ_4	$[^4S$ ^2P $^2D]$
$^1/_2$	1	$\Phi(1^+, 1^-, -1^+)$ $\Phi(1^+, 0^+, 0^-)$	Φ_5 Φ_6	$[^2P$ $^2D]$
$^1/_2$	2	$\Phi(1^+, 1^-, 0^+)$	Φ_7	$[^2D]$

Wir berechnen nun die Wirkung der Operatoren $L_x - iL_y$ und $S_x - iS_y$ auf einige der oben angegebenen Zustände:

$$(L_x - iL_y)\,\Phi_5 = \sqrt{2}\,(\Phi_3 - \Phi_2),$$

$$(L_x - iL_y)\,\Phi_6 = \sqrt{2}\,(\Phi_2 - \Phi_4),$$

$$(L_x - iL_y)\,\Phi_7 = \sqrt{2}\,(\Phi_5 - \Phi_6),$$

$$(S_x - iS_y)\,\Phi_1 = \Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4.$$

Φ_1 ist die Wellenfunktion des ^4S-Zustandes mit $M_S = 3/2$, $M_L = 0$. Wendet man auf diese Funktion den Operator $S_x - iS_y$ an, so erhält man nach (1)

$$(S_x - iS_y)\,\Phi\left(^4S, \frac{3}{2}, 0\right) = \sqrt{3}\,\Phi\left(^4S, \frac{1}{2}, 0\right).$$

Wegen

$$(S_x - iS_y)\,\Phi_1 = \Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4$$

folgt

$$\Phi\left(^4S, \frac{1}{2}, 0\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}(\Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4).$$

Analog erhalten wir für den ^2D-Term die Wellenfunktionen

$$\Phi\left(^2D, \frac{1}{2}, 2\right) = \Phi_7,$$

$$\Phi\left(^2D, \frac{1}{2}, 1\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_5 - \Phi_6),$$

$$\Phi\left(^2D, \frac{1}{2}, 0\right) = \frac{1}{\sqrt{6}}(\Phi_3 - 2\Phi_2 + \Phi_4).$$

Der Zustand $^2P, 1/2, 1$ ($M_S = 1/2$, $M_L = 1$) ist eine Linearkombination der Zustände Φ_5 und Φ_6 und orthogonal zu dem Zustand $^2D, 1/2, 1$. Daher erhalten wir

$$\Phi\left(^2P, \frac{1}{2}, 1\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_5 + \Phi_6)$$

und ferner

$$\Phi\left(^2P, \frac{1}{2}, 0\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_3 - \Phi_4).$$

Nach demselben Verfahren erhält man die Wellenfunktionen, welche den negativen Werten der Komponenten entsprechen.

7.43. Wie man der nebenstehenden Tabelle entnimmt, hat man zur Bestimmung der Eigenfunktionen der beiden ^2D-Terme zunächst die Eigenfunktionen der Terme ^2H, ^2G, ^4F und ^2F zu berechnen:

M_S	M_L			
$^1/_2$	5	$\Phi(2^+, 2^-, 1^+)$	Φ_1	$[^2H]$
$^1/_2$	4	$\Phi(2^+, 2^-, 0^+)$ $\Phi(2^+, 1^+, 1^-)$	Φ_2 Φ_3	^2H ^2G
$^1/_2$	3	$\Phi(2^+, 2^-, -1^+)$ $\Phi(2^+, 1^+, 0^-)$ $\Phi(2^+, 1^-, 0^+)$ $\Phi(2^-, 1^+, 0^+)$	Φ_4 Φ_5 Φ_6 Φ_7	^2H ^2G ^4F ^2F
$^1/_2$	2	$\Phi(2^+, 2^-, -2^+)$ $\Phi(2^+, 1^+, -1^-)$ $\Phi(2^+, 1^-, -1^+)$ $\Phi(2^-, 1^+, -1^+)$ $\Phi(2^+, 0^+, 0^-)$ $\Phi(1^+, 1^-, 0^+)$	Φ_8 Φ_9 Φ_{10} Φ_{11} Φ_{12} Φ_{13}	^2H ^2G ^4F ^2F ^2D ^2D
$^3/_2$	3	$\Phi(2^+, 1^+, 0^+)$	Φ_{14}	$[^4F]$
$^3/_2$	2	$\Phi(2^+, 1^+, -1^+)$	Φ_{15}	$[^4F]$

Wir berechnen zunächst die Wirkung der Operatoren $L_x - iL_y$ und $S_x - iS_y$ auf einige der oben angegebenen Zustände:

$$(L_x - iL_y)\,\Phi_1 = -2\Phi_3 + \sqrt{6}\,\Phi_2,$$

$$(L_x - iL_y)\,\Phi_2 = -2\Phi_7 + 2\Phi_6 + \sqrt{6}\,\Phi_4,$$

$$(L_x - iL_y)\,\Phi_3 = -\sqrt{6}\,\Phi_6 + \sqrt{6}\,\Phi_5,$$

$$(S_x - iS_y)\,\Phi_{14} = \Phi_7 + \Phi_6 + \Phi_5,$$

$$(L_x - iL_y)\,\Phi_4 = -2\Phi_{11} + 2\Phi_{10} + 2\Phi_6,$$

$$(L_x - iL_y)\,\Phi_5 = \sqrt{6}\,\Phi_{12} + \sqrt{6}\,\Phi_9,$$

$$(S_x - iS_y)\,\Phi_{15} = \Phi_{11} + \Phi_{10} + \Phi_9,$$

$$(L_x - iL_y)\,\Phi_6 = 2\Phi_{13} - \sqrt{6}\,\Phi_{12} + \sqrt{6}\,\Phi_{10},$$

$$(L_x - iL_y)\,\Phi_7 = -2\Phi_{13} + \sqrt{6}\,\Phi_{11}.$$

Die Wellenfunktion des Zustandes $^2H, {}^1/_2, 5$ ($M_S = {}^1/_2, M_L = 5$) ist gleich Φ_1, d. h. $\Phi(^2H, {}^1/_2, 5) = \Phi_1$. Durch Anwendung des Operators $L_x - iL_y$ erhalten wir

$$(L_x - iL_y)\,\Phi\left(^2H, \frac{1}{2}, 5\right) = \sqrt{10}\,\Phi\left(^2H, \frac{1}{2}, 4\right).$$

Wegen

$$(L_x - iL_y)\,\Phi_1 = -2\Phi_3 + \sqrt{6}\,\Phi_2$$

folgt

$$\Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 4\right) = \frac{1}{\sqrt{10}}\{\sqrt{6}\,\Phi_2 - 2\Phi_3\}.$$

Die anderen zum ${}^2H$-Term gehörigen Zustände, die zur Lösung des Problems benötigt werden, ergeben sich zu

$$\Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 3\right) = \frac{1}{\sqrt{30}}\{\sqrt{6}\,\Phi_4 - 2\Phi_5 + 4\Phi_6 - 2\Phi_7\},$$

$$\Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{30}}\{\Phi_8 - \Phi_9 + 3\Phi_{10} - 2\Phi_{11} - 3\Phi_{12} + \sqrt{6}\,\Phi_{13}\}.$$

Der Zustand $\Phi({}^2G, {}^1/_2, 4)$ ist eine Linearkombination aus den Zuständen Φ_2 und Φ_3 und orthogonal zum Zustand $\Phi({}^2H, {}^1/_2, 4)$. Aus diesen Bedingungen finden wir die Wellenfunktion

$$\Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 4\right) = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{10}}\{2\Phi_2 + \sqrt{6}\,\Phi_3\}.$$

Da zu verschiedenen Termen gehörige Zustände nicht durch Phasenbeziehungen miteinander verknüpft sind, können wir $\alpha = 0$ setzen.

Die anderen Zustände des ${}^2G$-Terms ergeben sich durch sukzessive Anwendung des Operators $L_x - iL_y$:

$$\Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 4\right) = \frac{1}{\sqrt{10}}\{2\Phi_2 + \sqrt{6}\,\Phi_3\},$$

$$\Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 3\right) = \frac{1}{\sqrt{20}}\{\sqrt{6}\Phi_4 + 3\Phi_5 - \Phi_6 - 2\Phi_7\},$$

$$\Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 2\right) = \sqrt{\frac{3}{140}}\left\{2\Phi_8 + 3\Phi_9 + \Phi_{10} - 4\Phi_{11} + 4\Phi_{12} + \sqrt{\frac{2}{3}}\,\Phi_{13}\right\}.$$

Um das Problem lösen zu können, müssen wir noch die Funktionen

$$\Phi\left({}^4F, \frac{1}{2}, 2\right) \quad \text{und} \quad \Phi\left({}^2F, \frac{1}{2}, 2\right)$$

bestimmen. Wegen

$$\Phi\left({}^4F, \frac{3}{2}, 3\right) = \Phi_{14}$$

erhalten wir durch Anwendung des Operators $S_x - iS_y$ den Zustand $\Phi(^4F, {}^1/_2, 3)$:

$$(S_x - iS_y)\,\Phi\left(^4F, \frac{3}{2}, 3\right) = \sqrt{3}\,\Phi\left(^4F, \frac{1}{2}, 3\right) = (S_x - iS_y)\,\Phi_{14},$$

$$\Phi\left(^4F, \frac{1}{2}, 3\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}\{\Phi_5 + \Phi_6 + \Phi_7\}.$$

Aus dem Zustand $\Phi(^4F, {}^1/_2, 3)$ finden wir durch Anwendung des Operators $L_x - iL_y$ den Zustand $\Phi(^4F, {}^1/_2, 2)$:

$$\Phi\left(^4F, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}\{\Phi_9 + \Phi_{10} + \Phi_{11}\}.$$

Die Wellenfunktion $\Phi(^2F, {}^1/_2, 3)$ ergibt sich aus der Tatsache, daß sie orthogonal ist zu den drei Funktionen

$$\Phi\left(^2H, \frac{1}{2}, 3\right), \quad \Phi\left(^2G, \frac{1}{2}, 3\right), \quad \Phi\left(^4F, \frac{1}{2}, 3\right).$$

Die aus diesen Bedingungen bestimmte normierte Funktion $\Phi(^2F, {}^1/_2, 3)$ ist

$$\Phi\left(^2F, \frac{1}{2}, 3\right) = \frac{1}{\sqrt{12}}\{-\sqrt{6}\,\Phi_4 + \Phi_5 + \Phi_6 - 2\Phi_7\}.$$

Schließlich haben wir

$$\Phi\left(^2F, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{12}}\{-2\Phi_8 + \Phi_9 - \Phi_{10} + \sqrt{6}\,\Phi_{13}\}.$$

Wir haben nun vier Zustände mit $M_S = {}^1/_2$ und $M_L = 2$:

$$\Phi\left(^2H, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{30}}\{\Phi_8 - \Phi_9 + 3\Phi_{10} - 2\Phi_{11} - 3\Phi_{12} + \sqrt{6}\,\Phi_{13}\},$$

$$\Phi\left(^2G, \frac{1}{2}, 2\right) = \sqrt{\frac{3}{140}}\left\{2\Phi_8 + 3\Phi_9 + \Phi_{10} - 4\Phi_{11} + 4\Phi_{12} + \sqrt{\frac{2}{3}}\,\Phi_{13}\right\},$$

$$\Phi\left(^4F, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}\{\Phi_9 + \Phi_{10} + \Phi_{11}\},$$

$$\Phi\left(^2F, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{12}}\{-2\Phi_8 + \Phi_9 - \Phi_{10} + \sqrt{6}\,\Phi_{13}\}.$$

In diese Gruppe gehen weiter zwei ^2D-Zustände ein, die zueinander und auch zu den oben angegebenen vier Zuständen orthogonal sind. Aus der Orthogonalitäts- und Normierungsbedingung erhalten wir die orthonormierten Funktionen

$$\Phi\left(a\,^2D, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{2}\{-\Phi_8 - \Phi_9 + \Phi_{10} + \Phi_{12}\},$$

$$\Phi\left(b\,^2D, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{84}}\{-5\Phi_8 + 3\Phi_9 + \Phi_{10} - 4\Phi_{11} - 3\Phi_{12} - 2\sqrt{6}\,\Phi_{13}\}.$$

Die übrigen Wellenfunktionen der ^2D-Zustände, die zu anderen Werten der Drehimpulskomponenten gehören, lassen sich durch sukzessive Anwendung der Operatoren $L_x - iL_y$ und $S_x - iS_y$ leicht bestimmen.

7.44. Wir schreiben zunächst alle zur Konfiguration $npn'p$ gehörigen Zustände auf. Dabei beschränken wir uns auf nichtnegative Werte von M_S und M_L:

pp		M_S	
		1	0
M_L	2	$\Phi_1(1^+, 1^+)$	$\Phi_2(1^+, 1^-)$ $\Phi_3(1^-, 1^+)$
	1	$\Phi_4(1^+, 0^+)$ $\Phi_5(0^+, 1^+)$	$\Phi_6(1^+, 0^-)$ $\Phi_7(0^+, 1^-)$ $\Phi_8(1^-, 0^+)$ $\Phi_9(0^-, 1^+)$
	0	$\Phi_{10}(1^+, -1^+)$ $\Phi_{11}(0^+, 0^+)$ $\Phi_{12}(-1^+, 1^+)$	$\Phi_{13}(1^+, -1^-)$ $\Phi_{14}(0^+, 0^-)$ $\Phi_{15}(-1^+, 1^-)$ $\Phi_{16}(1^-, -1^+)$ $\Phi_{17}(0^-, 0^+)$ $\Phi_{18}(-1^-, 1^+)$

Aus der Tabelle geht hervor, daß die vorgegebene Konfiguration die Terme ^1S, ^3S, ^1P, ^3P, ^1D und ^3D besitzt.

Bei der Lösung des Problems wählen wir die in der Tabelle angegebenen Funktionen als Funktionen der nullten Näherung.

Da die Energie nicht von den Eigenwerten M_S und M_L abhängt, kann die Störmatrix mit Hilfe von Untermatrizen in folgender Weise dargestellt

werden:

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} M_S = 1 \\ M_L = 2 \end{pmatrix} & & & & & \\ & \begin{pmatrix} M_S = 0 \\ M_L = 2 \end{pmatrix} & & & \mathbf{0} & \\ & & \begin{pmatrix} M_S = 1 \\ M_L = 1 \end{pmatrix} & & & \\ & & & \begin{pmatrix} M_S = 0 \\ M_L = 1 \end{pmatrix} & & \\ & \mathbf{0} & & & \begin{pmatrix} M_S = 1 \\ M_L = 0 \end{pmatrix} & \\ & & & & & \begin{pmatrix} M_S = 0 \\ M_L = 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

Den Störoperator bezeichnen wir mit V. In der ersten Untermatrix tritt nur der ^3D-Term auf. Folglich gilt

$$E^{(1)}(^3D) = V_{11}.$$

In der zweiten Untermatrix ($M_L = 2$, $M_S = 0$) erscheint die Kombination der beiden Terme ^3D und ^1D:

$$E^{(1)}(^3D) + E^{(1)}(^1D) = V_{22} + V_{33}.$$

In der dritten Untermatrix ($M_L = 1$, $M_S = 1$) haben wir die Kombination der beiden Terme ^3D und ^3P:

$$E^{(1)}(^3D) + E^{(1)}(^3P) = V_{44} + V_{55}.$$

In der vierten Untermatrix ($M_L = 1$, $M_S = 0$) kommen die vier Terme ^3D, ^1D, ^3P und ^1P vor:

$$E^{(1)}(^3D) + E^{(1)}(^1D) + E^{(1)}(^3P) + E^{(1)}(^1P)$$
$$= V_{66} + V_{77} + V_{88} + V_{99}.$$

In der fünften Untermatrix ($M_L = 0$, $M_S = 1$) gibt es die drei Terme ^3D, ^3P, ^3S:

$$E^{(1)}(^3D) + E^{(1)}(^3P) + E^{(1)}(^3S) = V_{10,10} + V_{11,11} + V_{12,12}.$$

Schließlich tragen zur sechsten Untermatrix ($M_L = 0$, $M_S = 0$) alle Terme bei (^3D, ^3P, ^3S, ^1D, ^1P, ^1S):

$$E^{(1)}(^3D) + E^{(1)}(^1D) + E^{(1)}(^3P) + E^{(1)}(^1P) + E^{(1)}(^3S) + E^{(1)}(^1S)$$
$$= V_{13,13} + V_{14,14} + V_{15,15} + V_{16,16} + V_{17,17} + V_{18,18}.$$

Mit Hilfe dieser Gleichungen lassen sich die Energiekorrektionen der Terme durch die Diagonalmatrixelemente ausdrücken:

$$E^{(1)}(^3D) = V_{11},$$

$$E^{(1)}(^1D) = V_{22} + V_{33} - V_{11},$$

$$E^{(1)}(^3P) = V_{44} + V_{55} - V_{11},$$

$$E^{(1)}(^1P) = V_{66} + V_{77} + V_{88} + V_{99} + V_{11} - V_{22} - V_{33} - V_{44} - V_{55}$$

usw.

7.46. Der Ausdruck

$$\frac{e\hbar}{2\mu c}(L_z + 2S_z) H$$

ist eine kleine Störung. Wir betrachten die RUSSELL-SAUNDERS-Kopplung. In diesem Fall kommutiert H_0 mit den Operatoren $\mathfrak{J}^2$, J_z, $\mathfrak{L}^2$, $\mathfrak{S}^2$. Die Energieniveaus des ungestörten Zustandes werden durch die Quantenzahlen J, L, S bestimmt. Jedes dieser Niveaus ist bezüglich der Richtung des Vektors $\mathfrak{J}$ entartet, wobei der Entartungsgrad $2J + 1$ beträgt.

Da die bezüglich J_z nichtdiagonalen Matrixelemente des Operators $L_z + 2S_z$ verschwinden, ist die Energiekorrektion einfach gleich dem Mittelwert des Operators $L_z + 2S_z$ in dem durch die Quantenzahlen J, M_J, L, S charakterisierten Zustand. Zur Berechnung dieses Mittelwertes setzen wir in der Formel der Aufgabe 4.35. $g_1 = 1$, $g_2 = 2$, $J_1 = L$, $J_2 = S$ und erhalten

$$\overline{L_z + 2S_z} = M_J \left\{\frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}\right\} = M_J g.$$

Nach den obigen Überlegungen ist die Aufspaltung der Niveaus gegeben durch

$$E^{(1)}_{JLS} = \frac{e\hbar H}{2\mu c} g M_J.$$

7.51. Die Energie des Atoms im Magnetfeld ist von derselben Größenordnung wie die Energie der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Deshalb kombinieren wir den Operator der Spin-Bahn-Wechselwirkung $\varphi(r)\,\mathfrak{l}\mathfrak{s}$ (vgl. Aufgabe 7.10.) mit dem Operator $\frac{e\hbar}{2\mu c}(l_z + 2s_z)\,|\mathfrak{H}|$ und betrachten die Summe

$$V = \varphi(r)\,\mathfrak{l}\mathfrak{s} + \frac{e\hbar}{2\mu c}\,|\mathfrak{H}|\,(l_z + 2s_z)$$

als kleine Störung. Im ungestörten Zustand werden das Quadrat und die z-Komponente des Bahndrehimpulses sowie das Quadrat und die z-Komponente des Spins Konstanten der Bewegung sein. Im vorliegenden Fall ist es zweckmäßiger, einen anderen Satz von Erhaltungsgrößen zu wählen. Wir werden den ungestörten stationären Zustand durch die Quantenzahlen n, l, j, m_j charakterisieren ($\mathfrak{l}^2$, $\mathfrak{j}^2$, j_z sind mit H_0 vertauschbar). Der Entartungsgrad ist im Falle des Coulomb-Feldes gleich $2n^2$ und für ein beliebiges Zentralfeld gleich $2(2l + 1)$. Es ist nicht erforderlich, eine Säkulargleichung von so hohem Grade zu lösen. Wir bemerken, daß das Quadrat des Bahndrehimpulses und die z-Komponente des Gesamtdrehimpulses im gestörten Zustand Konstanten der Bewegung sind. Infolgedessen muß die Wellenfunktion des gestörten Problems eine Kombination der Funktionen $\psi^{(0)}_{nljm_j}$ sein, die denselben Werten von n, l, m_j entsprechen, d. h.

$$\psi = c_1\psi^{(0)}(n, l, j = l - \tfrac{1}{2}, m_j) + c_2\psi^{(0)}(n, l, j = l + \tfrac{1}{2}, m_j)$$

oder in anderer Form

$$\psi = c_1 \frac{R^{(0)}_{nl}}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l + m_j + \frac{1}{2}}\; Y_{l,m_j-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l - m_j + \frac{1}{2}}\; Y_{l,m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} + c_2 \frac{R^{(0)}_{nl}}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l - m_j + \frac{1}{2}}\; Y_{l,m_j-\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{l + m_j + \frac{1}{2}}\; Y_{l,m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}.$$

Die Matrixelemente des Operators V sind

$$(V)^{nl(j=l+\frac{1}{2})m_j}_{nl(j=l+\frac{1}{2})m_j} = A\,\frac{l}{2} + H\mu_0 m_j\left(1 + \frac{1}{2l+1}\right),$$

$$(V)^{nl(j=l-\frac{1}{2})m_j}_{nl(j=l-\frac{1}{2})m_j} = -A\,\frac{l+1}{2} + H\mu_0 m_j\left(1 - \frac{1}{2l+1}\right),$$

$$(V)^{nl(j=l-\frac{1}{2})m_j}_{nl(j=l+\frac{1}{2})m_j} = (V)^{nl(j=l+\frac{1}{2})m_j}_{nl(j=l-\frac{1}{2})m_j} = \frac{H\mu_0}{2l+1}\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m_j^2}$$

mit

$$A = \int_0^\infty R_{nl}(r)\,\varphi(r)\,R_{nl}(r)\,r^2\,dr \quad \text{und} \quad \mu_0 = \frac{e\hbar}{2\mu c}.$$

Durch Lösung der Säkulargleichung

$$\begin{vmatrix} E^{(0)}_{nl} + A\,\frac{l}{2} + H\mu_0 m_j\left(1 + \frac{1}{2l+1}\right) - E, & \frac{H\mu_0}{2l+1}\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m_j^2} \\ \frac{H\mu_0}{2l+1}\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m_j^2}, & E^{(0)}_{nl} - A\,\frac{l+1}{2} + H\mu_0 m_j\left(1 - \frac{1}{2l+1}\right) - E \end{vmatrix} = 0$$

ergibt sich die Energie E. Wir bezeichnen mit E_+ und E_- die Energie eines Einelektronenatoms unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung, wobei E_+ zum Zustand mit $j = l + \frac{1}{2}$ und E_- zum Zustand mit $j = l - \frac{1}{2}$ gehören.

Wie aus der Lösung der Aufgabe 7.10. folgt, gilt

$$E_+ = E_{nl}^{(0)} + A\frac{l}{2}, \quad E_- = E_{nl}^{(0)} - A\frac{l+1}{2}.$$

Durch Lösung der Säkulargleichung folgt für E:

$$E = \frac{1}{2}(E_+ + E_-) + H\mu_0 m_j$$
$$\pm \sqrt{\frac{1}{4}(E_+ - E_-)^2 + H\mu_0 \frac{m_j}{2l+1}(E_+ - E_-) + \frac{1}{4}H^2\mu_0^2}.$$

Wir betrachten die Grenzfälle.

7.51.1. Im Falle schwacher Felder, d. h. für $\mu_0 H \ll E_+ - E_-$, erhält man für die Energie folgende Ausdrücke:

$$E = E_+ + H\mu_0 m_j \frac{2l+2}{2l+1},$$

$$E = E_- - H\mu_0 m_j \frac{2l}{2l+1}.$$

Der erste Wert entspricht der Energie des n-ten Niveaus des Zustandes mit $j = l + \frac{1}{2}$, der zweite gehört zu $j = l - \frac{1}{2}$ (vgl. Aufgabe 7.46.).

7.51.2. Im Falle starker Felder, d. h. für $\mu_0 H \gg E_+ - E_-$, gilt

$$E = \frac{1}{2}(E_+ + E_-) + H\mu_0 m_j \pm \frac{1}{2}H\mu_0 \pm \frac{m_j}{2l+1}(E_+ - E_-).$$

Wir bezeichnen mit E_s die Energie des Schwerpunktes der Niveaus für den Fall, daß kein Magnetfeld vorhanden ist:

$$E_s = \frac{E_+(l+1) + E_- l}{2l+1}$$

(die statistischen Gewichte der Zustände mit E_+ und E_- verhalten sich zueinander wie $(2l+1)/2l$) und mit ΔE die Differenz $E_+ - E_-$. Damit erhalten wir

$$E = E_s + H\mu_0\left(m_j \pm \frac{1}{2}\right) \pm \frac{\Delta E}{2l+1}\left(m_j \mp \frac{1}{2}\right).$$

Man überzeugt sich leicht davon, daß dieser Ausdruck mit dem in der Aufgabe 7.53. angegebenen identisch ist.

Das obere Vorzeichen entspricht dem Zustand mit $m_l = m_j - \frac{1}{2}$, $m_s = \frac{1}{2}$, das untere Vorzeichen gehört zum Zustand mit $m_l = m_j + \frac{1}{2}$, $m_s = -\frac{1}{2}$.

7.52. Man erhält

$$c_1 = \sqrt{\tfrac{1}{2}(1 + \gamma)}, \quad c_2 = \sqrt{\tfrac{1}{2}(1 - \gamma)}$$

für das obere Niveau und

$$c_1 = \sqrt{\tfrac{1}{2}(1 - \gamma)}, \quad c_2 = -\sqrt{\tfrac{1}{2}(1 + \gamma)}$$

für das untere Niveau, wobei

$$\gamma = \frac{\frac{1}{2}\Delta E + \frac{m_j}{2l + 1} H\mu_0}{\sqrt{\frac{1}{4}(\Delta E)^2 + \frac{m_j}{2l + 1}\Delta E H\mu_0 + \frac{1}{4} H^2\mu_0^2}}$$

ist. Wir betrachten die Grenzfälle.

7.52.1. Das Magnetfeld sei vernachlässigbar schwach, d. h.

$$\Delta E \gg H\mu_0 .$$

Dann gilt $\gamma \approx 1$. Für das obere Niveau erhalten wir $c_1 = 1$, $c_2 = 0$ und für das untere $c_1 = 0$, $c_2 = 1$.

7.52.2. Das Magnetfeld sei stark:

$$\Delta E \ll H\mu_0 .$$

In diesem Falle haben wir $\gamma = \dfrac{m_j}{l + \frac{1}{2}}$ und

$$c_1 = \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}}, \quad c_2 = \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}}$$

für das obere Niveau sowie

$$c_1 = \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}}, \quad c_2 = -\sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}}$$

für das untere Niveau. Setzen wir die gewonnenen Ausdrücke für c_1 und c_2 in die Ausdrücke für die Wellenfunktionen in der Aufgabe 7.51. ein, so finden wir

$$\psi = R_{nl}^{(0)} \begin{pmatrix} Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{für das obere Niveau}$$

und

$$\psi = R_{nl}^{(0)} \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix} \quad \text{für das untere Niveau.}$$

7.53. Da die Energie im Magnetfeld bedeutend größer als die Energie der Spin-Bahn-Wechselwirkung ist, können wir die letztere in erster Näherung vernachlässigen.

In diesem Falle sind l_z und s_z Konstanten der Bewegung, und die Aufspaltungsenergie ist

$$E^{(1)} = \frac{e\hbar}{2\mu\, c} H(m_l + 2m_s).$$

In zweiter Näherung berücksichtigen wir die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Die der Aufspaltung im Magnetfeld überlagerte Multiplettaufspaltung wird durch den Mittelwert des Operators

$$\frac{e^2}{2\mu^2\, c^2}\, \frac{1}{r^3}\, (\mathfrak{l}\mathfrak{s})$$

(vgl. Aufgabe 7.10.) im Zustand mit vorgegebenen Werten von m_l und m_s bestimmt. Besitzt eine Drehimpulskomponente einen festen Wert, so sind die Mittelwerte der beiden anderen Komponenten gleich Null. Daher gilt

$$\overline{\mathfrak{l}\mathfrak{s}} = m_l m_s.$$

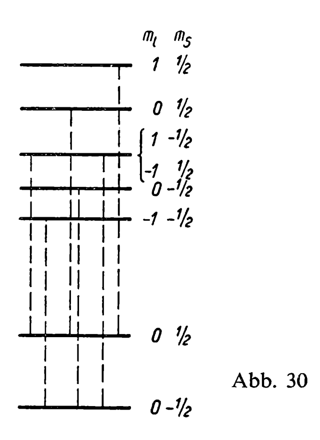


Abb. 30

Die Aufspaltungsenergie der Niveaus beträgt also unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung

$$E^{(1)} = \frac{e\hbar}{2\mu\, c} H(m_l + 2m_s) + \frac{e^2\hbar^2}{2\mu^2\, c^2} \overline{\left(\frac{1}{r^3}\right)} m_l m_s.$$

In dieser Beziehung drücken wir $\overline{1/r^3}$ durch die Energie der Feinstrukturaufspaltung ohne Magnetfeld aus. Man findet leicht (vgl. Aufgabe 7.10.)

$$\frac{e^2\hbar^2}{2\mu^2 c^2}\overline{\left(\frac{1}{r^3}\right)} = \frac{E_{n,l,j=l+\frac{1}{2}} - E_{n,l,j=l-\frac{1}{2}}}{l+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta E}{l+\frac{1}{2}}.$$

Schließlich erhalten wir für $E^{(1)}$ den Ausdruck

$$E^{(1)} = \frac{e\hbar}{2\mu c} H(m_l + 2m_s) + \frac{\Delta E}{l+\frac{1}{2}} m_l m_s.$$

Abb. 30 zeigt schematisch die Aufspaltung der $1s$- und $2p$-Terme eines Alkaliatoms im starken Magnetfeld.

7.54. Die Störenergie ist im vorliegenden Fall durch

$$V = \frac{e\hbar}{\mu c}\frac{1}{r^3}\beta\mathfrak{i}\left\{\frac{3(\mathfrak{r}\mathfrak{s})\,\mathfrak{r}}{r^2} - \mathfrak{s}\right\} + \frac{e\hbar}{\mu c} H s_z + \beta H i_z$$

gegeben. In diesem Ausdruck können wir den letzten Term vernachlässigen, da das magnetische Moment des Kerns klein gegen das magnetische Moment des Elektrons ist $\left(\beta < \frac{e\hbar}{2\mu c}\right)$.

Gehen wir so wie bei der Lösung der Aufgabe 7.51. vor, so finden wir die Säkulargleichung

$$\begin{vmatrix} E_+ + \frac{\mu_0 H}{i+\frac{1}{2}} m_f - E & \frac{H\mu_0}{i+\frac{1}{2}}\sqrt{\left(i+\frac{1}{2}\right)^2 - m_f^2} \\ \frac{H\mu_0}{i+\frac{1}{2}}\sqrt{\left(i+\frac{1}{2}\right)^2 - m_f^2} & E_- - \frac{H\mu_0}{i+\frac{1}{2}} m_f - E \end{vmatrix} = 0.$$

Dabei sind E_+ und E_- die Energien der Terme unter Berücksichtigung der Hyperfeinstruktur, wobei E_+ zum Zustand mit $f = i + \frac{1}{2}$ und E_- zum Zustand mit $f = i - \frac{1}{2}$ gehört; m_f ist der Eigenwert der z-Komponente des Gesamtdrehimpulses ($m_f = f, f-1, \ldots, -f$), ferner ist $\mu_0 = e\hbar/2\mu c$. Durch Lösung der Säkulargleichung ergibt sich

$$E = \frac{E_+ + E_-}{2} \pm \frac{\Delta E}{2}\sqrt{1 + \frac{2\xi}{i+\frac{1}{2}} m_f + \xi^2}$$

mit

$$\Delta E = E_+ - E_- \quad \text{und} \quad \xi = \frac{2\mu_0 H}{\Delta E}.$$

Wir bestimmen nun die Größenordnung der magnetischen Feldstärke, bei der die durch die gewonnene Formel beschriebene Aufspaltung beobachtet

wird. Gemäß den Bedingungen der Aufgabe haben wir

$$H \approx \frac{|\Delta E_{ff'}|}{\mu_0}.$$

Im Falle des Natriumatoms gilt $\Delta E_{ff'} = 0{,}0583\ \mathrm{cm}^{-1} = 1{,}962 \cdot 10^{-16}$ erg. Mit $\mu_0 = 0{,}922 \cdot 10^{-20}$ Gauß · cm³ ergibt sich die Feldstärke H größenordnungsmäßig zu $H \approx 600$ Gauß.

Wir untersuchen die Grenzfälle.

7.54.1. Im Falle schwacher Felder, d. h. für $\mu_0 H \ll \Delta E$, erhalten wir die Energie

$$E = E_+ + \frac{H\mu_0}{i + \frac{1}{2}} m_f,$$

$$E = E_- - \frac{H\mu_0}{i + \frac{1}{2}} m_f.$$

7.54.2. Im Falle starker Felder, d. h. für $\mu_0 H \gg \Delta E$, folgt

$$E = \frac{1}{2}(E_+ + E_-) \pm H\mu_0.$$

7.57. Die normierten Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms lauten für den ungestörten Zustand (vgl. Aufgabe 4.21.)

$$\left.\begin{aligned}
\psi_{nl(j=l+\frac{1}{2})m_j} &= \frac{R_{n,j-\frac{1}{2}}}{\sqrt{2j}} \begin{pmatrix} \sqrt{j + m_j}\, Y_{j-\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{j - m_j}\, Y_{j-\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = u_-, \\
\psi_{nl(j=l-\frac{1}{2})m_j} &= \frac{R_{n,j+\frac{1}{2}}}{\sqrt{2j+2}} \begin{pmatrix} \sqrt{j + 1 - m_j}\, Y_{j+\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}} \\ -\sqrt{j + 1 + m_j}\, Y_{j+\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = u_+.
\end{aligned}\right\} \quad (1)$$

Die Energie wird durch die beiden Quantenzahlen n, j bestimmt. Befindet sich das Atom in einem homogenen elektrischen Feld ($E_x = E_y = 0$, $E_z = |\mathfrak{E}|$), dann bleibt j_z nach wie vor eine Konstante der Bewegung, der Bahndrehimpuls dagegen nicht. Die Matrixelemente des Störoperators $V = e\,|\mathfrak{E}|\, z$ verschwinden für Übergänge zwischen Zuständen mit verschiedenen Werten von m_j. Die Diagonalelemente des Operators V sind ebenfalls gleich Null:

$$\sum_\sigma \int u_+^* z u_+ \, d\tau = \sum_\sigma \int u_-^* z u_- \, d\tau. \quad (2)$$

Um die Aufspaltung zu bestimmen, müssen wir daher diejenigen Matrixelemente von V berechnen, welche dem Übergang aus dem Zustand n, j, m_j, $l = j + \frac{1}{2}$ in den Zustand n, j, m_j, $l = j - \frac{1}{2}$ entsprechen. Das gesuchte

Matrixelement ist

$$V_{21} = V_{12} = e|\mathfrak{E}| \sum_\sigma \int u_-^* z u_+ \, d\tau$$

$$= \int_0^\infty r^3 R_{n,j-\frac{1}{2}}(r)\, R_{n,j+\frac{1}{2}}(r)\, dr \frac{1}{2\sqrt{j(j+1)}} \tag{3}$$

$$\times \left\{\sqrt{(j+m_j)(j-m_j+1)} \int Y^*_{j-\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}\, Y_{j+\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}} \cos\vartheta \, d\Omega\right.$$

$$\left. - \sqrt{(j-m_j)(j+m_j+1)} \int Y^*_{j-\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\, Y_{j+\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}} \cos\vartheta \, d\Omega\right\}.$$

Zunächst integrieren wir über die Winkel. Auf Grund der Beziehung

$$\cos\vartheta \, Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\, Y_{l+1,m}(\vartheta, \varphi) + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}\, Y_{l-1,m}(\vartheta, \varphi)$$

folgt für den Ausdruck in der geschweiften Klammer in (3)

$$\frac{1}{2\sqrt{j(j+1)}} \{(j+m_j)(j-m_j+1) - (j+m_j+1)(j-m_j)\} = \frac{m_j}{\sqrt{j(j+1)}}.$$

Die Integration über r liefert

$$-\frac{3}{2} n \sqrt{n^2 - \left(j + \frac{1}{2}\right)^2}.$$

Wir erhalten für das Element (3) der Störmatrix schließlich

$$V_{21} = V_{12} = -\frac{3}{4} n \frac{\sqrt{n^2 - (j+\frac{1}{2})^2}}{j(j+1)} m_j e|\mathfrak{E}|.$$

Die Energiekorrektion erhält man, indem man die Säkulargleichung löst:

$$\begin{vmatrix} -\varepsilon & V_{12} \\ V_{21} & -\varepsilon \end{vmatrix} = 0, \quad \varepsilon = \pm V_{12};$$

$$\varepsilon = \pm\frac{3}{4} \sqrt{n^2 - \left(j + \frac{1}{2}\right)^2} \frac{n m_j}{j(j+1)} e|\mathfrak{E}|.$$

Bei vorgegebenem n wird der Term mit $j = n - \frac{1}{2}$ im elektrischen Feld nicht aufgespalten, da er bezüglich der Quantenzahl l nicht entartet ist (l besitzt den definierten Wert $l = j - \frac{1}{2} = n - 1$). Alle übrigen Feinstrukturterme werden in $2j + 1$ äquidistante Niveaus aufgespalten ($m_j = -j, \ldots, +j$).

7.58. Man findet

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2\mu c} \frac{(j + \frac{1}{2})^2}{j(j + 1)} m_j .$$

7.59. Im betrachteten Fall sind die Spin-Bahn-Wechselwirkung V_1, die durch die relativistische Massenänderung bedingte Korrektion V_2 und die Energie des Elektrons in einem äußeren homogenen elektrischen Feld $V_3 = -Fz$ von derselben Größenordnung. Deshalb betrachten wir ihre Summe als kleine Störung am System. Als ungestörten Zustand des Systems wählen wir den Zustand, der durch definierte Werte des Bahndrehimpulses l, seiner z-Komponente m_l und der Spinkomponente m_s in Richtung des elektrischen Feldes (z-Achse) charakterisiert ist.

Wir erhalten als Matrixelemente von V_1, V_2 und V_3 (in atomaren Einheiten):

$$(V_1)_{lm_l}^{l'm_l'} = \begin{cases} \dfrac{1}{2}\alpha^2 \dfrac{m_l(m - m_l)}{n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \delta_{ll'} & \text{für} \quad m_l' = m_l, \\[2ex] \dfrac{1}{4}\alpha^2 \dfrac{\sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 - m^2}}{n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \delta_{ll'} & \text{für} \quad m_l' = m \pm \dfrac{1}{2} \quad \text{und} \\[2ex] & \phantom{\text{für}} \quad m_l = m \mp \dfrac{1}{2}, \\[2ex] 0 & \text{für alle anderen Zustände,} \end{cases}$$

$$(V_2)_{lm_l}^{l'm_l'} = -\frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{n^3}\left(\frac{l}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n}\right)\delta_{ll'}\delta_{m_l m_l'},$$

$$(V_3)_{lm_l}^{l'm_l'} = -\frac{3n}{2}\sqrt{\frac{(n^2 - l^2)(l^2 - m_l^2)}{4l^2 - 1}}\, F\delta_{l',l-1}\delta_{m_l' m_l}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}.$$

Im Falle $n = 2$ ändert sich die Energie der Zustände mit den Quantenzahlen $l = 1$, $m = m_l + m_s = \pm\frac{3}{2}$ ($j = \frac{3}{2}$) im elektrischen Feld nicht. Die durch V_1 und V_2 verursachte Verschiebung dieses Niveaus beträgt $\alpha^2/128$ at. Einh. (vgl. Aufgabe 7.10.)

Man erhält die Aufspaltung des Niveaus mit den Quantenzahlen $n = 2$, $m = \pm\frac{1}{2}$ durch Lösung der Säkulargleichung

$$\begin{vmatrix} -\frac{11}{4}\delta - E^{(1)} & \delta\sqrt{2} & 0 \\ \delta\sqrt{2} & -\frac{7}{4}\delta - E^{(1)} & -3F \\ 0 & -3F & -\frac{15}{4}\delta - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0,$$

wobei $3\delta = \alpha^2/32$ at. Einh. die Feinstrukturaufspaltung des Niveaus mit $n = 2$ für den Fall ist, daß kein äußeres Feld vorhanden ist. Führt man in diese Gleichung die Größe ε ein, die mit $E^{(1)}$ durch die Beziehung

$$E^{(1)} = \varepsilon - \frac{11}{4}\delta$$

verknüpft ist $\left(-\frac{11}{4}\delta\right.$ bedeutet die Energie, die dem Schwerpunkt der drei Energieniveaus entspricht, $\left.\frac{E_1^{(1)} + E_2^{(1)} + E_3^{(1)}}{3} = -\frac{11}{4}\delta\right)$, so erhält man

$$\begin{vmatrix} -\varepsilon & \delta\sqrt{2} & 0 \\ \delta\sqrt{2} & \delta - \varepsilon & -3F \\ 0 & -3F & -\delta - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

oder

$$\varepsilon^3 - \varepsilon(3\delta^2 + 9F^2) - 2\delta^3 = 0.$$

Wir lösen die letzte Gleichung für die beiden Grenzfälle schwacher und starker Felder ($F \ll \delta$ bzw. $F \gg \delta$). Im ersten Fall erhalten wir

$$\varepsilon_1 = -\delta - \sqrt{3}\,F - \frac{F^2}{\delta},$$

$$\varepsilon_2 = -\delta + \sqrt{3}\,F - \frac{F^2}{\delta},$$

$$\varepsilon_3 = 2\delta + 2\frac{F^2}{\delta}$$

und im zweiten

$$\varepsilon_1 = -3F - \frac{1}{2}\frac{\delta^2}{F} + \frac{1}{9}\frac{\delta^3}{F^2},$$

$$\varepsilon_2 = -\frac{2}{9}\frac{\delta^3}{F^2},$$

$$\varepsilon_3 = 3F + \frac{1}{2}\frac{\delta^2}{F} + \frac{1}{9}\frac{\delta^3}{F^2}.$$

7.60. Der Mittelwert der Gesamtenergie beträgt

$$\overline{H} = \frac{\int \psi_0^*(1 + \lambda u)\, H\psi_0(1 + \lambda u)\, d\tau}{\int \psi_0^*\psi_0(1 + \lambda u)^2\, d\tau}. \tag{1}$$

Durch partielle Integration formen wir den Zähler dieses Ausdrucks zweckmäßig um.

Der Operator der kinetischen Energie der Elektronen lautet

$$T = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} \Delta_i.$$

Dabei bedeuten n die Zahl der Elektronen und Δ_i den LAPLACE-Operator, der auf die Koordinaten des i-ten Elektrons wirkt. Wir benutzen atomare Einheiten. Der Ausdruck für den Mittelwert der kinetischen Energie kann in einer Form geschrieben werden, die in ψ_0^* und ψ_0 symmetrisch ist:

$$\overline{T} = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2}\int \{\psi_0^*(1 + \lambda u)\,\Delta_i(1 + \lambda u)\,\psi_0 + \psi_0(1 + \lambda u)\,\Delta_i(1 + \lambda u)\,\psi_0^*\}\, d\tau.$$

Differenziert man unter dem Integralzeichen, so folgt

$$\begin{aligned}\overline{T} = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2}\int \{&\psi_0^*(1 + \lambda u)^2\,\Delta_i\psi_0 + \psi_0(1 + \lambda u)^2\,\Delta_i\psi_0^* \\ &+ 2\lambda\psi_0\psi_0^*(1 + \lambda u)\,\Delta_i u \\ &+ 2\lambda(1 + \lambda u)\,\nabla_i(\psi_0^*\psi_0)\,\nabla_i u\}\, d\tau.\end{aligned} \tag{2}$$

Wir vereinfachen die beiden letzten Ausdrücke. Dazu betrachten wir die Identität

$$\begin{aligned}&\nabla_i\,\{\psi_0^*\psi_0(1 + \lambda u)\,\nabla_i u\} \\ &= \psi_0^*\psi_0(1 + \lambda u)\,\Delta_i u + (1 + \lambda u)\,\nabla_i(\psi_0^*\psi_0)\,\nabla_i u + \lambda\psi_0^*\psi(\nabla_i u)^2.\end{aligned} \tag{3}$$

Integrieren wir (3) über den gesamten Konfigurationsraum, so finden wir

$$\int \{\psi_0^*\psi_0(1 + \lambda u)\, \Delta_i u + (1 + \lambda u)\, \nabla_i(\psi_0^*\psi_0)\, \nabla_i u\}\, d\tau = -\lambda \int \psi_0^*\psi(\nabla_i u)^2\, d\tau. \tag{4}$$

Durch Einsetzen von (4) in (2) ergibt sich

$$\bar{T} = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2}\int \{\psi_0^*(1 + \lambda u)^2\, \Delta_i\psi_0 + \psi_0(1 + \lambda u)^2\, \Delta_i\psi_0^*\}\, d\tau + \frac{\lambda^2}{2}\sum_{i=1}^{n}\int \psi_0^*\psi_0(\nabla_i u)^2\, d\tau.$$

Der HAMILTON-Operator lautet $H = H_0 + u = T + V + u$. Berücksichtigen wir die Tatsache, daß V mit $1 + \lambda u$ vertauschbar ist, so läßt sich (1) in folgender Form darstellen:

$$\bar{H} = E_0 + \frac{\frac{1}{2}\int (1 + \lambda u)^2\, (\psi_0^* H\psi_0 + \psi_0 H\psi_0^*)\, d\tau + \frac{\lambda^2}{2}\sum_{i=1}^{n}\int \psi_0^*\psi_0(\nabla_i u)^2\, d\tau}{\int (1 + \lambda u)^2\, \psi_0^*\psi_0\, d\tau}.$$

Mit $H_0\psi_0 = E_0\psi_0$ folgt

$$\bar{H} = E_0 + \frac{\int \psi_0^* u(1 + \lambda u)^2\, \psi_0\, d\tau + \frac{\lambda^2}{2}\sum_{i=1}^{n}\int \psi_0^*\psi_0(\nabla_i u)^2\, d\tau}{\int (1 + \lambda u)^2\, \psi_0^*\psi_0\, d\tau}$$

oder

$$\bar{H} = E_0 + \frac{(u)_{00} + 2\lambda(u^2)_{00} + \lambda^2(u^3)_{00} + \frac{\lambda^2}{2}\sum_{i=1}^{n}\{(\nabla_i u)^2\}_{00}}{1 + 2\lambda(u)_{00} + \lambda^2(u^2)_{00}}, \tag{5}$$

wobei

$$(u)_{00} = \int \psi_0^* u\psi_0\, d\tau, \quad (u^2)_{00} = \int \psi_0^* u^2\psi_0\, d\tau, \ldots$$

gilt. Wir entwickeln den zweiten Term in (5) in eine Reihe und vernachlässigen die Terme mit $(u^3)_{00}$, $(u)_{00}^3$ usw.

Für die Energiekorrektion ΔE erhalten wir näherungsweise

$$\Delta E \approx (u)_{00} + 2\lambda(u^2)_{00} - 2\lambda(u)_{00}^2 + \frac{\lambda^2}{2}\sum_{i=1}^{n}\{(\nabla_i u)^2\}_{00}. \tag{6}$$

Der Wert des Variationsparameters λ ergibt sich aus der Bedingung

$$\frac{d\Delta E}{d\lambda} = 2(u^2)_{00} - 2(u)_{00}^2 + \lambda \sum_{i=1}^{n} \{(\nabla_i u)^2\}_{00} = 0$$

zu

$$\lambda = 2\,\frac{(u)_{00}^2 - (u^2)_{00}}{\sum\limits_{i=1}^{n} \{(\nabla_i u)^2\}_{00}}.$$

Setzt man λ in (6) ein, so folgt

$$\Delta E = (u)_{00} - 2\,\frac{\{(u)_{00}^2 - (u^2)_{00}\}^2}{\sum\limits_{i=1}^{n} \{(\nabla_i u)^2\}_{00}}. \tag{7}$$

7.61. Befindet sich das Atom in einem homogenen elektrischen Feld $\mathfrak{E}$, das die Richtung der z-Achse besitzt, so lautet der Störoperator

$$u = -|\mathfrak{E}| \sum_{i=1}^{n} z_i = -|\mathfrak{E}|\, z.$$

Das Matrixelement $(u)_{00}$ ist gleich Null.

Auf Grund der Gleichung (7) der letzten Aufgabe haben wir

$$\Delta E \approx -2|\mathfrak{E}|^2 \frac{\{(z^2)_{00}\}}{n},$$

wobei n die Zahl der Elektronen ist.

Daraus folgt für den Polarisationskoeffizienten

$$\alpha = \frac{4\,\{(z^2)_{00}\}^2}{n}.$$

Wir bemerken, daß diese Formel, die durch Einführung eines einzigen Variationsparameters gewonnen wurde, nur für Wasserstoff- und Heliumatome eine gute Näherung darstellt. Im Falle von Atomen mit mehreren Elektronenschalen müssen wir beachten, daß nicht alle Elektronenschalen gleichartig deformiert sind. Um mit Hilfe der Variationsmethode ein befriedigenderes Resultat zu erhalten, müssen wir daher für jede Elektronenschale einen eigenen Variationsparameter verwenden.

Für das Wasserstoffatom gilt

$$(z^2)_{00} = \frac{1}{3}(r^2)_{00} = \frac{1}{3}\,\frac{4\pi}{\pi} \int_0^\infty e^{-2r}\, r^4\, dr = 1$$

und folglich $\alpha = 4$ at. Einh. Im CGS-System erhält man

$$\alpha = 4\left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)[\text{cm}^3].$$

Für das Heliumatom wählen wir die Wellenfunktion des Grundzustandes in der Form

$$\psi_0 = \frac{Z_{\text{eff}}^3}{\pi}\, \mathrm{e}^{-Z_{\text{eff}}(r_1+r_2)}$$

mit $Z_{\text{eff}} = \frac{27}{16}$ (vgl. Aufgabe 7.14.).

Die Rechnung ergibt

$$\alpha = 0{,}98 \text{ at. Einh.} \quad \text{oder} \quad \alpha = 0{,}98\left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)[\text{cm}^3].$$

Für den gewonnenen Wert von α findet man die Dielektrizitätskonstante des Heliums unter Standardbedingungen zu $\varepsilon = 1{,}00049$. Der beobachtete Wert beträgt $\varepsilon = 1{,}00074$.

Die verhältnismäßig große Differenz zwischen dem berechneten und dem experimentellen Wert erklärt sich im wesentlichen dadurch, daß eine grob genäherte ungestörte Funktion benutzt wurde.

7.62. Man findet

7.62.1.
$$E^{(1)} = \frac{m_j}{8j(j+1)}\frac{e\hbar}{\mu c}\left\{(2j+1)^2 H \pm \sqrt{(2j+1)^2 H^2 + \frac{36n^2}{\alpha^2}\left\{n^2 - \left(j+\frac{1}{2}\right)^2\right\}|\mathfrak{E}|^2}\right\}$$

$$\left(\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}\right)$$

(vgl. die Aufgaben 7.57. und 7.59.) und

7.62.2.
$$E^{(1)}\left(n = 2, m_j = \pm\frac{3}{2}\right) = -\frac{\alpha^2}{128}\left(\frac{\mu e^4}{\hbar^2}\right) \pm \frac{e\hbar}{\mu c}H,$$

$$E^{(1)}\left(n = 2, m_j = \pm\frac{1}{2}\right) = \varepsilon - \frac{11}{384}\alpha^2\left(\frac{\mu e^4}{\hbar^2}\right).$$

Dabei ergibt sich ε durch Lösung der Gleichung dritten Grades

$$\varepsilon^3 \mp 2\beta\varepsilon^2 - \varepsilon(3\delta^2 + 9F^2 - \beta^2) \pm 2\delta^2\beta - 2\delta^3 = 0$$

mit

$$\beta = \frac{e\hbar}{2\mu c} H, \quad F = e|\mathfrak{E}| \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \quad \delta = \frac{\alpha^2}{96} \frac{\mu e^4}{\hbar^2}.$$

Im Falle starker Felder ($\delta \ll F, \delta \ll \beta$) gilt

$$\varepsilon_1 = \pm\beta - 3F - \frac{1}{2} \frac{9F \mp \beta}{9F^2 \mp 3F\beta} \delta^2,$$

$$\varepsilon_2 = \pm \frac{2\beta}{9F^2 - \beta^2} \delta^2,$$

$$\varepsilon_3 = \pm\beta + 3F + \frac{1}{2} \frac{9F \pm \beta}{9F \pm 3F\beta} \delta^2$$

(vgl. Aufgabe 7.59.).

7.63. Wir legen die z-Achse in die Richtung des Magnetfeldes und die x-Achse in die Richtung des elektrischen Feldes. Der Operator der potentiellen Energie eines Elektrons, das sich in diesen Feldern befindet, besitzt die Form

$$w = \frac{e\hbar}{2\mu c} (l_z + 2s_z) |\mathfrak{H}| + e|\mathfrak{E}| x.$$

Wir fassen diesen Operator als kleine Störung auf und charakterisieren den ungestörten stationären Zustand durch die Quantenzahlen n, l, m, σ (m und σ sind die z-Komponenten des Bahndrehimpulses und des Spins). Die nichtverschwindenden Matrixelemente von x sind

$$(x)_{l,m-1}^{l-1,m} = (x)_{l-1,m}^{l,m-1} = \frac{3}{4} n \sqrt{\frac{(n^2 - l^2)(l - m + 1)(l - m)}{(2l + 1)(2l - 1)}}\, a,$$

$$(x)_{l-1,m-1}^{l,m} = (x)_{l,m}^{l-1,m-1} = -\frac{3}{4} n \sqrt{\frac{(n^2 - l^2)(l + m - 1)(l + m)}{(2l + 1)(2l - 1)}}\, a,$$

$$\left(a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right).$$

Wir betrachten den Fall $n = 2$. Die z-Komponente des Spins sei gleich $+1/2$. Mit den Bezeichnungen

$$\beta = \frac{e\hbar}{2\mu c} |\mathfrak{H}|, \quad \gamma = \frac{3}{\sqrt{2}} e|\mathfrak{E}| a$$

erhalten wir die Matrix des Störoperators in der Form

$$\begin{pmatrix} 2\beta & 0 & 0 & -\gamma \\ 0 & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma \\ -\gamma & 0 & \gamma & \beta \end{pmatrix}.$$

Die Zustände sind nach fallenden Werten von l und m geordnet. Der Zustand mit den Quantenzahlen $l = 1$, $m = 0$ kombiniert nicht mit den übrigen Zuständen. Die Energie dieses Zustandes beträgt $E_1^{(1)} = \beta$. Die drei übrigen Eigenwerte der Störmatrix findet man, indem man die Säkulargleichung

$$E^3 - 3\beta E^2 + 2(\beta^2 - \gamma^2)\, E + 2\gamma^2\beta = 0$$

löst:

$$E_2^{(1)} = \beta, \quad E_{3,4}^{(1)} = \beta \pm \sqrt{\beta^2 + 2\gamma^2}.$$

Setzt man die Größen für β und γ ein, so erhält man

$$E_2^{(1)} = \frac{e\hbar}{2\mu\, c}\,|\mathfrak{H}|, \quad E_{3,4}^{(1)} = \frac{e\hbar}{2\mu\, c}\left\{|\mathfrak{H}| \pm \sqrt{|\mathfrak{H}|^2 + \frac{36}{\alpha^2}\,|\mathfrak{E}|^2}\right\}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}.$$

8. MOLEKÜL

8.1. Vernachlässigt man den Unterschied zwischen dem Schwerpunkt des Moleküls und dem Schwerpunkt der Kerne und nimmt an, der Schwerpunkt liege im Ursprung des Koordinatensystems, so kann man die SCHRÖDINGER-Gleichung eines zweiatomigen Moleküls in folgender Weise schreiben:

$$\Bigg\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\right)$$
$$- \frac{\hbar^2}{2M\varrho^2}\left[\frac{\partial}{\partial\varrho}\left(\varrho^2\frac{\partial}{\partial\varrho}\right) + \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$
$$+ V(x_i, y_i, z_i; \varrho, \vartheta, \varphi)\Bigg\}\,\psi(\ldots, x_i, y_i, z_i, \ldots; \varrho, \vartheta, \varphi) = E\psi.$$

Dabei sind x_i, y_i, z_i die Koordinaten des i-ten Elektrons im raumfesten Bezugssystem, ϑ und φ die Winkel, welche die räumliche Lage der Verbindungsgeraden zwischen den Kernen beschreiben, ϱ der Abstand zwischen den Kernen und M die reduzierte Masse der beiden Kerne. Ein Nachteil dieser Gleichung besteht darin, daß die Winkel ϑ und φ in den Ausdruck für die potentielle Energie V der elektrostatischen Wechselwirkung eingehen. Um die SCHRÖ-

DINGER-Gleichung in einer zweckmäßigeren Form zu erhalten, führen wir ein neues Koordinatensystem ξ, η, ζ ein, das mit den Kernen rotiert. Die ζ-Achse liege in der Verbindungsgeraden zwischen den Kernen und die ξ-Achse in der xy-Ebene. Wir wählen die positive Richtung der ξ-Achse so, daß die Achsen z, ζ, ξ ein Rechtssystem bilden. Die Beziehungen zwischen den alten und neuen Koordinaten lauten

$$\xi_i = -x_i \sin \varphi + y_i \cos \varphi,$$

$$\eta_i = -x_i \cos \vartheta \cos \varphi - y_i \cos \vartheta \sin \varphi + z_i \sin \vartheta,$$

$$\zeta_i = x_i \sin \vartheta \cos \varphi + y_i \sin \vartheta \sin \varphi + z_i \cos \vartheta.$$

Unterscheiden wir die Differentiation bei konstanten x_i, y_i, z_i von der Differentiation bei konstanten ξ_i, η_i, ζ_i durch einen Strich am ∂, so haben wir

$$\frac{\partial'}{\partial' \vartheta} = \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \sum_i \left(\zeta_i \frac{\partial}{\partial \eta_i} - \eta_i \frac{\partial}{\partial \zeta_i} \right),$$

$$\frac{\partial'}{\partial' \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi} - \sum_i \left\{ \sin \vartheta \left(\zeta_i \frac{\partial}{\partial \xi_i} - \xi_i \frac{\partial}{\partial \zeta_i} \right) + \cos \vartheta \left(\xi_i \frac{\partial}{\partial \eta_i} - \eta_i \frac{\partial}{\partial \xi_i} \right) \right\}.$$

Man verifiziert leicht die Beziehung

$$\sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) = \sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta_i^2} \right).$$

Die potentielle Energie besitzt im neuen Koordinatensystem die Form

$$V = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\varrho} + \sum_{i>k} \frac{e^2}{r_{ik}^*} - \sum_{k=1}^{n} \frac{Z_1 e^2}{r_{1k}^*} - \sum_{k=1}^{n} \frac{Z_2 e^2}{r_{2k}^*},$$

wobei

$$r_{ik}^* = \sqrt{(\xi_i - \xi_k)^2 + (\eta_i - \eta_k)^2 + (\zeta_i - \zeta_k)^2}$$

der Abstand zwischen dem i-ten und dem k-ten Elektron,

$$r_{1k}^* = \sqrt{\xi_k^2 + \eta_k^2 + \left(\zeta_k + \varrho \frac{M_2}{M_1 + M_2} \right)^2}$$

der Abstand zwischen dem k-ten Elektron und dem ersten Kern und

$$r_{2k}^* = \sqrt{\xi_k^2 + \eta_k^2 + \left(\zeta_k - \varrho \frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2}$$

der Abstand zwischen dem k-ten Elektron und dem zweiten Kern ist. Im neuen Koordinatensystem hängt die potentielle Energie also nicht von den Winkeln ϑ und φ ab.

Die SCHRÖDINGER-Gleichung lautet jetzt

$$\Big\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\zeta_i^2}\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\cot\vartheta\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}-iL_\xi\right)\right.$$

$$\left.+\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}-iL_\xi\right)^2+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}-i\sin\vartheta\,L_\eta-i\cos\vartheta\,L_\zeta\right)^2\right]$$

$$+V(\xi_i,\eta_i,\zeta_i;\varrho)-E\Big\}\,\psi(\xi_i,\eta_i,\zeta_i;\varrho,\vartheta,\varphi)=0.$$

Dabei sind L_ξ, L_η und L_ζ (in Einheiten $\hbar$) die Operatoren der Bahndrehimpulskomponenten der Elektronen im Koordinatensystem ξ,η,ζ.

8.2. Wir bezeichnen die Spinvariable des i-ten Elektrons bezüglich des raumfesten Systems mit s_i' und bezüglich des körperfesten Koordinatensystems mit s_i. Die Funktionen $\psi(\ldots,s_i,\ldots)$ mit den auf das Koordinatensystem ξ,η,ζ bezogenen Spins und die Funktionen $\psi(\ldots,s_i',\ldots)$ mit den auf das Koordinatensystem x, y, z bezogenen Spins hängen durch eine lineare Transformation miteinander zusammen:

$$\psi(\ldots,s_i,\ldots)$$

$$=\sum_{s_1',\ldots,s_i',\ldots}S(s_1,\ldots,s_i,\ldots,s_1',\ldots,s_i',\ldots)\,\psi(\ldots,s_i',\ldots)$$

$$=S\psi(\ldots,s_i',\ldots),$$

wobei

$$S(s_1,s_2,\ldots,s_i,\ldots,s_1',\ldots,s_i',\ldots)$$

$$=S(s_1;s_1')\,S(s_2;s_2')\cdot\ldots\cdot S(s_i;s_i')\cdot\ldots$$

und

$$S\left(\frac{1}{2};\frac{1}{2}\right)=\cos\frac{\vartheta}{2}\,e^{\frac{i}{2}\left(\varphi+\frac{\pi}{2}\right)},$$

$$S\left(\frac{1}{2};-\frac{1}{2}\right)=i\sin\frac{\vartheta}{2}\,e^{-\frac{i}{2}\left(\varphi+\frac{\pi}{2}\right)},$$

$$S\left(-\frac{1}{2};\frac{1}{2}\right)=i\sin\frac{\vartheta}{2}\,e^{\frac{i}{2}\left(\varphi+\frac{\pi}{2}\right)},$$

$$S\left(-\frac{1}{2};-\frac{1}{2}\right)=\cos\frac{\vartheta}{2}\,e^{-\frac{i}{2}\left(\varphi+\frac{\pi}{2}\right)}$$

sind. Die gesuchte SCHRÖDINGER-Gleichung wird die Form

$$[SHS^{-1} - E]\,\psi(\ldots, \xi_i, \eta_i, \zeta_i, s_i, \ldots;\ \varrho, \vartheta, \varphi) = 0$$

besitzen, wobei H der in der vorigen Aufgabe bestimmte HAMILTON-Operator ist.

Nach einfachen Umformungen erhält man die SCHRÖDINGER-Gleichung in der Form

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial\eta_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial\zeta_i^2}\right)\right.$$

$$- \frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \cot\vartheta\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} - iM_\xi\right) + \left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} - iM_\xi\right)^2\right.$$

$$\left.+ \frac{1}{\sin^2\vartheta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\sin\vartheta\, M_\eta - i\cos\vartheta\, M_\zeta\right)^2\right]$$

$$\left.+ V - E\right\}\psi(\ldots, \xi_i, \eta_i, \zeta_i, s_i, \ldots; \varrho, \vartheta, \varphi) = 0.$$

Zum Unterschied von der vorigen Aufgabe bezeichnen hier M_ξ, M_η, M_ζ die Operatoren der Komponenten des Gesamtdrehimpulses (Bahndrehimpuls und Spin) der Elektronen.

8.3. Wir nehmen an, daß wir die Lösung des Problems mit festen Zentren (d. h. die Elektronenterme $E^{\mathrm{el}}(\varrho)$ und die Wellenfunktion Φ_{el}) kennen. Wir untersuchen zunächst den Kopplungsfall *a*. Die Komponente des Gesamtdrehimpulses (Bahndrehimpuls und Spin) in Richtung der Molekülachse sei in dem durch die Wellenfunktion Φ_{el} beschriebenen Zustand gleich Ω. Wir multiplizieren die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$H\Phi_{\mathrm{el}}(\xi_i, \eta_i, \zeta_i; \sigma_i; \varrho) f(\varrho)\, \Theta(\vartheta, \varphi)$$

$$= E\Phi_{\mathrm{el}}(\xi_i, \eta_i, \zeta_i; \sigma_i; \varrho) f(\varrho)\, \Theta(\vartheta, \varphi)$$

von links mit Φ_{el}^*, integrieren in dem Problem mit festen Zentren über die Koordinaten und summieren über σ_i. Unter Beachtung der Beziehungen

$$\int \Phi_{\mathrm{el}}^* M_\xi \Phi_{\mathrm{el}}\, d\tau = 0, \quad \int \Phi_{\mathrm{el}}^* M_\eta \Phi_{\mathrm{el}}\, d\tau = 0$$

erhalten wir

$$\left[B\frac{\partial}{\partial\varrho}\left(\varrho^2\frac{\partial}{\partial\varrho}\right) - E^{\mathrm{el}}(\varrho) - U(\varrho) - E^{\mathrm{rot}} + E\right]f(\varrho) = 0,$$

$$B\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\Omega\cos\vartheta\right)^2\right]\Theta(\vartheta,\varphi)$$
$$+ E^{\mathrm{rot}}\,\Theta(\vartheta,\varphi) = 0.$$

In den letzten beiden Gleichungen haben wir die folgenden Abkürzungen verwendet:

$$U(\varrho) = \frac{1}{M}\int \Phi_{\mathrm{el}}^*\left\{\frac{1}{\varrho^2}(M_\xi^2 + M_\eta^2) - \frac{\partial^2}{\partial\varrho^2}\right\}\Phi_{\mathrm{el}}\,d\tau,$$

$$B = \frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\varrho^2}.$$

Die Größe B wird als Rotationskonstante bezeichnet.

8.4. N_2-Molekül (Atome im ^4S-Zustand):

$$^1\Sigma_g^+,\ ^3\Sigma_u^+,\ ^5\Sigma_g^+,\ ^7\Sigma_u^+;$$

Br_2-Molekül (Atome im ^2P-Zustand):

$$2\,^1\Sigma_g^+,\ ^1\Sigma_u^-,\ ^1\Pi_g,\ ^1\Pi_u,\ ^1\Delta_g;$$

$$2\,^3\Sigma_u^+,\ ^3\Sigma_g^-,\ ^3\Pi_g,\ ^3\Pi_u,\ ^1\Delta_u;$$

LiH-Molekül (Li-Atom im ^2S_g-Zustand, H-Atom im ^2S_g-Zustand):

$$^1\Sigma^+,\ ^3\Sigma^+;$$

HBr-Molekül (Br-Atom im ^2P_u-Zustand):

$$^1\Sigma^+,\ ^3\Sigma^+,\ ^1\Pi,\ ^3\Pi;$$

CN-Molekül (C-Atom im ^3P_g-Zustand, N-Atom im ^4S_u-Zustand):

$$^2\Sigma^+,\ ^4\Sigma^+,\ ^6\Sigma^+,\ ^2\Pi,\ ^4\Pi,\ ^6\Pi.$$

(Die Zahl vor dem Termsymbol bezeichnet die Multiplizität der Terme.)

8.5. Der Grundzustand des Heliumatoms ist dadurch charakterisiert, daß sich die beiden Elektronen im niedrigsten Energieniveau befinden (Para-Helium). Die Gesamteigenfunktion des Grundzustandes des Heliumatoms kann nähe-

rungsweise in der Form

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \psi_a(1)\, \psi_a(2)\{\eta_+(\sigma_1)\, \eta_-(\sigma_2) - \eta_+(\sigma_2)\, \eta_-(\sigma_1)\}$$

geschrieben werden, wobei ψ_a die Wasserstoffunktion ist.

Die Wasserstoffeigenfunktion besitzt die Form

$$\psi_b(3)\, \eta_+(\sigma_3) \quad \text{oder} \quad \psi_b(3)\, \eta_-(\sigma_3).$$

Ist der Abstand zwischen den beiden Atomen groß, so kann die Wellenfunktion des Systems als Produkt dargestellt werden:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \psi_a(1)\, \psi_a(2)\, \psi_b(3)\{\eta_+(\sigma_1)\, \eta_-(\sigma_2) - \eta_+(\sigma_2)\, \eta_-(\sigma_1)\}\, \eta_+(\sigma_3).$$

Berücksichtigen wir den Elektronenaustausch, so müssen wir fordern, daß die Eigenfunktion des Systems bezüglich der Vertauschung aller Elektronen antisymmetrisch ist. Nur eine antisymmetrische Funktion ist Eigenfunktion des Systems in nullter Näherung:

$$\begin{aligned} \Psi = \frac{1}{\sqrt{6(1-S)}} \{&\psi_a(1)\, \psi_a(2)\, \psi_b(3)[\eta_+(1)\, \eta_-(2) - \eta_+(2)\, \eta_-(1)]\, \eta_+(3) \\ &+ \psi_a(3)\, \psi_a(1)\, \psi_b(2)[\eta_+(3)\, \eta_-(1) - \eta_+(1)\, \eta_-(3)]\, \eta_+(2) \\ &+ \psi_a(2)\, \psi_a(3)\, \psi_b(1)[\eta_+(2)\, \eta_-(3) - \eta_+(3)\, \eta_-(2)]\, \eta_+(1)\}. \end{aligned} \tag{1}$$

In (1) ist

$$\frac{1}{\sqrt{6(1-S)}}$$

ein Normierungsfaktor mit

$$\begin{aligned} S &= \int \psi_a(1)\, \psi_a(2)\, \psi_b(3)\, \psi_a(2)\, \psi_a(3)\, \psi_b(1)\, d\tau_1\, d\tau_2\, d\tau_3 \\ &= \int \psi_a(1)\, \psi_a(2)\, \psi_b(3)\, \psi_a(1)\, \psi_a(3)\, \psi_b(2)\, d\tau_1\, d\tau_2\, d\tau_3 \\ &= \int \psi_a(1)\, \psi_a(3)\, \psi_b(2)\, \psi_a(2)\, \psi_a(3)\, \psi_b(1)\, d\tau_1\, d\tau_2\, d\tau_3. \end{aligned}$$

Nach der gewöhnlichen Störungstheorie gilt

$$\varepsilon = \sum_\sigma \int \Psi H \Psi\, d\tau,$$

wobei Ψ die Eigenfunktion in nullter Näherung und H die Störungsenergie bedeuten; summiert wird über die Spinvariablen. Wir müssen beachten, daß H für die verschiedenen Bestandteile der Funktion Ψ unterschiedliche Formen besitzt: für $\psi_a(1)\,\psi_a(2)\,\psi_b(3)$ ist die Störungsenergie durch

$$H = e^2\left(\frac{2}{R} - \frac{1}{r_{a3}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b2}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}}\right)$$

und für $\psi_a(1)\,\psi_a(3)\,\psi_b(2)$ durch

$$H = e^2\left(\frac{2}{R} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b3}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{32}}\right)$$

gegeben. Da sich die Integrale nur durch die Numerierung der Elektronen voneinander unterscheiden und mithin identisch sind, finden wir

$$\varepsilon = \frac{K - A}{1 - S} \tag{2}$$

mit

$$K = e^2 \int \left(\frac{2}{R} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} - \frac{1}{r_{a3}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b2}}\right) \times \psi_a^2(1)\,\psi_a^2(2)\,\psi_b^2(3)\,d\tau_1\,d\tau_2\,d\tau_3,$$

$$A = e^2 \int \left(\frac{2}{R} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} - \frac{1}{r_{a3}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b2}}\right) \times \psi_a(1)\,\psi_a(2)\,\psi_b(3)\,\psi_a(1)\,\psi_a(3)\,\psi_b(2)\,d\tau_1\,d\tau_2\,d\tau_3.$$

Die Integrale K, A und S besitzen im allgemeinen denselben Charakter wie die entsprechenden Integrale beim Problem des Wasserstoffmoleküls. Wie die Berechnung der Integrale zeigt, entspricht der Formel (2) eine Kurve, die eine Abstoßung beschreibt. Dieser Sachverhalt gilt nicht nur für das Heliumatom, sondern für alle Edelgase.

8.6. Separiert man die Bewegung des Massenmittelpunktes ab, so erhält man für die Wellenfunktion der Relativbewegung der Kerne die Gleichung

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + 2D\left(\frac{1}{\varrho} - \frac{1}{2\varrho^2}\right)\right]\psi = 0.$$

In Kugelkoordinaten folgt mit

$$\psi = \frac{\chi(\varrho)}{\varrho}\,Y_{KM}(\vartheta, \varphi)$$

für χ die Differentialgleichung

$$\frac{d^2\chi}{d\varrho^2} + \left[-\lambda^2 + \frac{2\gamma^2}{\varrho} - \frac{\gamma^2 + K(K+1)}{\varrho^2}\right]\chi = 0,$$

$$\lambda = \sqrt{-\frac{2\mu\, a^2 E}{\hbar^2}}, \quad \gamma^2 = \frac{2\mu\, a^2}{\hbar^2} D.$$

Die Variablentransformation

$$\chi(\varrho) = \varrho^s \, \mathrm{e}^{-\lambda\varrho} \, u(\varrho)$$

mit

$$s = \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + (K + \tfrac{1}{2})^2}$$

führt auf die hypergeometrische Differentialgleichung

$$\varrho u'' + (2s - 2\lambda\,\varrho)\, u' + (-2s\,\lambda + 2\gamma^2)\, u = 0.$$

Diese Gleichung besitzt die für $\varrho = 0$ endliche Lösung

$$u = cF\left(s - \frac{\gamma^2}{\lambda}, 2s; 2\lambda\,\varrho\right).$$

In Zuständen, die zum diskreten Spektrum gehören, muß die Wellenfunktion χ für $r \to \infty$ gegen Null gehen. Dazu ist notwendig, daß sich der Ausdruck für u auf ein Polynom reduziert, d. h.

$$s - \frac{\gamma^2}{\lambda} = -v,$$

wobei v eine nichtnegative ganze Zahl ist. Aus dieser Bedingung ergeben sich die Energieniveaus:

$$E_{vK} = -\frac{\hbar}{2\mu\, a^2} \frac{\gamma^4}{[v + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + (K + \frac{1}{2})^2}]^2}.$$

Der dimensionslose Parameter γ^2 ist der reduzierten Masse μ der Kerne proportional, so daß $\gamma^2 \gg 1$ gilt. Für nicht zu große Werte von v und K,

$$v \ll \gamma, \quad K \ll \gamma,$$

ergibt sich

$$E_{vK} = -D + \hbar\omega_0\left(v + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2\mu\, a^2}\left(K + \frac{1}{2}\right)^2$$

$$- \frac{3\hbar^2}{2\mu\, a^2}\left(v + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{3\hbar^3(K + \frac{1}{2})(v + \frac{1}{2})}{2\mu^2\, a^4\omega_0}$$

mit

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{2D}{\mu a^2}}.$$

Die Dissoziationsenergie beträgt näherungsweise

$$E_0 = D - \frac{\hbar\omega_0}{2}.$$

In dem Ausdruck für E_{vK} geben der zweite und der dritte Term die Energien der Schwingungs- und Rotationsbewegung an, der vierte Term berücksichtigt anharmonische Schwingungen, und der fünfte Term liefert die infolge der Wechselwirkung zwischen Rotations- und Schwingungsbewegung der Kerne zustande kommende Energiekorrektion.

Da D in atomaren Einheiten ($e = m = \hbar = 1$) größenordnungsmäßig gleich 1 ist, ergibt sich aus dem oben gewonnenen Resultat

$$D : \hbar\omega_0 : \frac{\hbar^2}{2\mu\, a^2} \sim 1 : \sqrt{\frac{m}{\mu}} : \frac{m}{\mu},$$

wobei m die Masse des Elektrons ist.

Wie man sieht, ist die Differenz zwischen den Energien der Elektronen in zwei verschiedenen Quantenzuständen (sie hat die Größenordnung D) groß gegen die Energiedifferenz zwischen zwei verschiedenen Schwingungszuständen, die ihrerseits wiederum groß gegen den Abstand zwischen den Rotationsniveaus ist.

8.7. Wir bestimmen das Minimum des effektiven Potentials

$$W = -2D\left(\frac{1}{\varrho} - \frac{1}{2\varrho^2}\right) + \frac{A^2}{\varrho^2} \quad \text{mit} \quad A^2 = \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2\mu\, a^2}$$

aus der Bedingung, daß dessen Ableitung verschwinden muß:

$$W' = -2D\left(-\frac{1}{\varrho_0^2} + \frac{1}{\varrho_0^3}\right) - \frac{2A^2}{\varrho_0^3} = 0.$$

Es folgt

$$\varrho_0 = 1 + \frac{A^2}{D}.$$

Wir entwickeln nun das effektive Potential in der Umgebung dieser Gleichgewichtslage,

$$W(\varrho) \approx -2D\left(\frac{1}{\varrho_0} - \frac{1}{\varrho_0^2}\right) + \frac{A^2}{\varrho_0^2} + \frac{D + A^2}{\varrho_0^4}(\varrho - \varrho_0)^2,$$

und erhalten, indem wir uns auf Terme der Ordnung A^2 beschränken:

$$W(\varrho) \approx -D + A^2 + (D - 3A^2)(\varrho - \varrho_0)^2.$$

Wir setzen diesen Ausdruck in die Gleichung für χ ein:

$$\frac{d^2\chi}{d\varrho^2} + \frac{2\mu a^2}{\hbar^2}[E + D - A^2 - (D - 3A^2)(\varrho - \varrho_0)^2]\chi = 0.$$

Daraus ergeben sich die Energieniveaus:

$$E_{vK} = -D + A^2 + \hbar\omega(v + \tfrac{1}{2}).$$

In der benutzten Näherung gilt

$$\omega = \omega_0\left(1 - \frac{3}{2}\frac{A^2}{D}\right), \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{2D}{\mu a^2}}.$$

Schließlich erhalten wir

$$E_{vK} = -D + \hbar\omega_0\left(v + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2\mu a^2} - \frac{3}{2}\frac{\hbar K(K+1)(v + \frac{1}{2})}{\mu^2 a^4 \omega_0}.$$

Da bei unseren Rechnungen anharmonische Effekte nicht berücksichtigt wurden, fehlt in dieser Formel der Term

$$-\frac{3\hbar^2}{2\mu a^2}\left(v + \frac{1}{2}\right)^2,$$

den wir bei der Lösung der vorigen Aufgabe erhielten.

8.8. In der Ultrarotbande haben wir es mit Übergängen zu tun, bei denen sich die Schwingungs- und Rotationsquantenzahlen ändern und die Elektronen im Grundzustand bleiben. Für den Übergang zwischen zwei Zuständen $v', J' \to v'', J''$ gilt

$$\omega = \omega_0(v' - v'') + \frac{\hbar}{2\mu a^2}[J'^2 + J' - J''^2 - J''].$$

Aus der Auswahlregel für J folgt $J'' = J' \pm 1$. Wir erhalten also die Frequenzen

$$\omega = \omega_0(v' - v'') - \frac{\hbar}{2\mu a^2} 2(J' + 1) \qquad \begin{pmatrix} J'' = J' + 1, \\ J' = 0, 1, 2, \ldots \end{pmatrix}$$

und

$$\omega = \omega_0(v' - v'') + \frac{\hbar}{2\mu a^2} 2J' \qquad \begin{pmatrix} J'' = J' - 1, \\ J' = 1, 2, \ldots \end{pmatrix}.$$

Diese beiden Frequenzfolgen werden in der Molekülspektroskopie als *P*- und *R*-Zweige bezeichnet.

Aus dem gewonnenen Ausdruck folgt, daß die Differenz der Frequenzen zweier benachbarter Linien für feste Werte von v und v'

$$\Delta \nu = \frac{\Delta \omega}{2\pi c} = \frac{\hbar}{2\pi c \mu a^2}$$

beträgt (in cm^{-1}). Das Trägheitsmoment des Moleküls $H^{35}Cl$ ist

$$I = \mu a^2 = \frac{\hbar}{2\pi c \Delta \nu} = 2{,}65 \cdot 10^{-40}\ \mathrm{g\,cm^2}.$$

Benutzen wir die reduzierte Masse

$$\mu = M_H \frac{1 \cdot 35}{1 + 35} = 0{,}972\, M_H = 1{,}61 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{g},$$

so finden wir für den Abstand zwischen den Kernen in HCl

$$a = \sqrt{\frac{I}{\mu}} = 1{,}29 \cdot 10^{-8}\ \mathrm{cm}.$$

Der dem Gleichgewichtszustand entsprechende Abstand a ist für die Moleküle DCl und HCl gleich, da die Form der Potentialkurven durch den Zustand der Elektronen bestimmt wird. Daher ergibt sich

$$\frac{\Delta \nu_{DCl}}{\Delta \nu_{HCl}} = \frac{\mu_{HCl}}{\mu_{DCl}}; \quad \Delta \nu_{DCl} = 10{,}7\ \mathrm{cm^{-1}}.$$

8.9. Der Abstand zwischen den ersten beiden Rotationsniveaus beträgt

$$\Delta \nu_{rot} = \frac{\hbar}{2\pi c I} = 41{,}5\ \mathrm{cm^{-1}}.$$

Wir erhalten daher

$$\frac{\Delta \nu_{rot}}{\Delta \nu_{schw}} = 0{,}0104.$$

8.10. Die Dissoziationsenergie des Moleküls D_2 ist gleich 4,54 eV.

8.11. Mit Hilfe der Variablentransformation

$$\xi = \frac{r - a}{a}$$

erhalten wir für die radiale Funktion χ/r die Gleichung

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2} + \frac{2\mu\, a^2}{\hbar^2}(E - V)\chi = 0.$$

Setzen wir

$$z = \alpha\, \mathrm{e}^{-2\beta\xi},$$

so ergibt sich

$$\chi'' + \frac{1}{z}\chi' + \left(-\frac{s^2}{z^2} - \frac{1}{4} + \frac{v + s + \frac{1}{2}}{z}\right)\chi = 0,$$

wobei

$$s = \sqrt{\frac{\mu a^2(D - E)}{\beta^2\hbar^2}}, \quad v + s + \frac{1}{2} = \frac{\mu a^2 D}{\alpha\beta^2\hbar^2}, \quad \alpha^2 = \frac{2\mu\, a^2 D}{\beta^2\hbar^2}$$

ist. Mit der Substitution

$$\chi = \mathrm{e}^{-z/2}\, z^s u(z)$$

erhalten wir aus der oben angegebenen Gleichung die hypergeometrische Differentialgleichung

$$zu'' + (2s + 1 - z)\, u' + nu = 0,$$

die durch die konfluente hypergeometrische Funktion

$$u = F(-v, 2s + 1; z)$$

befriedigt wird. Diese Funktion genügt der Bedingung, daß χ bei positiven Werten von s (diskretes Spektrum) für $r \to +\infty$ verschwinden muß. Da die Wellenfunktion für $r \to -\infty$ verschwinden muß, reduziert sich F auf ein Polynom, d. h., v ist eine negative ganze Zahl. Diese Bedingung ergibt das Energiespektrum

$$E_v = \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2\omega^2}{4D}\left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \quad \text{mit} \quad \omega = 4\beta\sqrt{\frac{D}{2\mu\, a^2}}.$$

Die Abstände zwischen den Schwingungsniveaus nehmen also mit wachsender Quantenzahl v ab.

Die Dissoziationsenergie beträgt

$$E_0 = D - \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar^2\omega^2}{16D}.$$

8.13. Wir charakterisieren die Drehung durch die EULERschen Winkel ϑ, ψ, φ. In diesem Falle sind die Koordinaten x, y, z eines Punktes im raumfesten Bezugssystem mit den Koordinaten ξ, η, ζ im bewegten Bezugssystem durch folgende Beziehungen verknüpft:

$$\left.\begin{aligned} x &= \xi(\cos\psi\cos\varphi - \sin\psi\sin\varphi\cos\vartheta) \\ &\quad - \eta(\cos\psi\sin\varphi + \sin\psi\cos\varphi\cos\vartheta) + \zeta\sin\psi\sin\vartheta, \\ y &= \xi(\sin\psi\cos\varphi + \cos\psi\sin\varphi\cos\vartheta) \\ &\quad + \eta(-\sin\psi\sin\varphi + \cos\psi\cos\varphi\cos\vartheta) - \zeta\cos\psi\sin\vartheta, \\ z &= \xi\sin\varphi\sin\vartheta + \eta\cos\varphi\sin\vartheta + \zeta\cos\vartheta. \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

Bei der Bestimmung der Operatoren J_ξ, J_η, J_ζ benutzen wir die Tatsache, daß der Operator J_ξ gleich $-i\dfrac{\partial}{\partial\alpha}$ ist, wobei α den Winkel in der zur ξ-Achse senkrechten Ebene bedeutet. Da sich die Winkel ändern, wenn man das Koordinatensystem ξ, η, ζ z. B. um den infinitesimalen Winkel $d\alpha$ um die ξ-Achse dreht, können wir den Operator J_ξ in Einheiten $\hbar$ folgendermaßen schreiben:

$$J_\xi = -i\left(\frac{\partial\vartheta}{\partial\alpha}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{\partial\varphi}{\partial\alpha}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial\alpha}\frac{\partial}{\partial\psi}\right).$$

Im Falle einer Drehung um den infinitesimalen Winkel $d\alpha$ um die ξ-Achse haben wir

$$\left.\begin{aligned} \xi &= \xi', \\ \eta &= \eta' - \zeta'\,d\alpha, \\ \zeta &= \eta'\,d\alpha + \zeta' \end{aligned}\right\} \quad (2)$$

und

$$\begin{aligned} z &= \xi'\sin(\varphi + d\varphi)\sin(\vartheta + d\vartheta) \\ &\quad + \eta'\cos(\varphi + d\varphi)\sin(\vartheta + d\vartheta) + \zeta'\cos(\vartheta + d\vartheta). \end{aligned} \quad (3)$$

Andererseits erhalten wir, indem wir (2) in (1) einsetzen:

$$\begin{aligned} z &= \xi'\sin\varphi\sin\vartheta + \eta'(\cos\varphi\sin\vartheta + \cos\vartheta\,d\alpha) \\ &\quad + \zeta'(\cos\vartheta - \cos\varphi\sin\vartheta\,d\alpha). \end{aligned} \quad (4)$$

Durch Vergleich von (2) mit (4) folgt

$$\frac{d\vartheta}{d\alpha} = \cos\varphi, \quad \frac{d\varphi}{d\alpha} = -\sin\varphi\cot\vartheta.$$

Analog ergibt sich

$$\frac{d\psi}{d\alpha} = \frac{\sin\varphi}{\sin\vartheta}.$$

Schließlich bekommen wir die Formel

$$J_\xi = -i\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \sin\varphi\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\sin\varphi}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\psi}\right).$$

Analog finden wir die Form der beiden anderen Operatoren:

$$J_\eta = -i\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cos\varphi\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\cos\varphi}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\psi}\right),$$

$$J_\zeta = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

8.16. Man erhält

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2A}J(J+1).$$

Jedes Niveau ist $(2J+1)$-fach entartet bezüglich der Richtung des Drehimpulses im raumfesten System und auch bezüglich der Richtung des Drehimpulses im körperfesten System.

8.17. Mit

$$H = \frac{1}{2A}\mathfrak{J}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{C} - \frac{1}{A}\right)J_\zeta^2$$

folgt

$$E = \frac{1}{2A}J(J+1) + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{C} - \frac{1}{A}\right)k^2,$$

worin k Eigenwert von J_ζ ist und $|k| \leqq J$ gilt. Im betrachteten Fall ist der gesamte Entartungsgrad gleich $2(2J+1)$. Der Entartungsgrad bezüglich der Drehimpulsrichtungen im raumfesten System ist wie oben gleich $2J+1$.

8.18.

$$-\frac{\hbar^2}{2A}\left\{\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial u}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial\psi^2}\right)\right.$$

$$\left. - 2\frac{\cos\vartheta}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 u}{\partial\psi\,\partial\varphi}\right\} - \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{C} - \frac{1}{A}\right)\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2} = Eu.$$

8.19. Da $J_\zeta = -i\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ und $J_z = -i\dfrac{\partial}{\partial\psi}$ mit $\mathfrak{J}^2$ vertauschbar sind, setzen wir die Eigenfunktion in der Form

$$\Phi_{kJM_J} = \Theta_{kJM_J}(\vartheta)\, e^{iM_J\psi}\, e^{ik\varphi}$$

an, wobei M_J und k die Werte der Drehimpulskomponenten in bezug auf die feste z-Achse und die rotierende ζ-Achse sind.

Da ψ und φ symmetrisch in die Gleichung für Φ_{kJM_J} eingehen und $|k| \leqq J$ gilt, folgt $|M_J| \leqq J$.

Wir betrachten die Operatoren

$$J_\xi + iJ_\eta = -i\, e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} - i\cot\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{i}{\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\psi}\right), \tag{1}$$

$$J_\xi - iJ_\eta = -i\, e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{i}{\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\psi}\right). \tag{2}$$

Wie man leicht erkennt, gilt

$$J_\zeta(J_\xi - iJ_\eta)\,\Phi_{kJM_J} = (k+1)\,(J_\xi - iJ_\eta)\,\Phi_{kJM_J},$$

d. h., $(J_\xi - iJ_\eta)\,\Phi_{kJM_J}$ ist eine Eigenfunktion des Operators J_ζ zum Eigenwert $k + 1$.

Setzen wir $k = J$, so erhalten wir

$$(J_\xi - iJ_\eta)\,\Phi_{JJM_J} \equiv 0.$$

Die letzte Beziehung läßt sich schreiben

$$\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{i}{\sin\vartheta}\,\frac{\partial}{\partial\psi}\right)\Theta_{JJM_J}(\vartheta)\, e^{iM_J\psi}\, e^{iJ\varphi} \equiv 0.$$

Wir erhalten also eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung zur Bestimmung von Θ_{JJM_J}:

$$\frac{d\Theta_{JJM_J}}{d\vartheta} + \frac{M_J - J\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\,\Theta_{JJM_J} = 0.$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lautet

$$\left.\begin{aligned} \Theta_{JJM_J} &= c\,\frac{(\sin\vartheta)^J}{\left(\tan\dfrac{\vartheta}{2}\right)^{M_J}} \\ \text{oder}\qquad & \\ \Theta_{JJM_J}(\vartheta) &= c(1-\cos\vartheta)^{\frac{J-M_J}{2}}\,(1+\cos\vartheta)^{\frac{J+M_J}{2}}. \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

Die Funktion Θ muß endlich sein. Das ist für $|M^J| \leqq J$ der Fall.

Um die Funktion Θ_{kJM_J} zu bestimmen, betrachten wir die Wirkung des Operators $J_\xi + iJ_\eta$ auf sie. Aus

$$J_\zeta(J_\xi + iJ_\eta)\,\Theta_{kJM_J} = (k-1)\,(J_\xi + iJ_\eta)\,\Theta_{kJM_J}$$

folgt

$$(J_\xi + iJ_\eta)\,\Theta_{kJM_J} = \alpha_k \Theta_{k-1,JM_J}. \tag{4}$$

Setzen wir den expliziten Ausdruck (1) für den Operator $J_\xi + iJ_\eta$ in (4) ein, so erhalten wir die Gleichung

$$\frac{d\Theta_{kJM_J}}{d\vartheta} + \frac{k\cos\vartheta - M_J}{\sin\vartheta}\,\Theta_{kJM_J} = i\alpha_k\Theta_{k-1,JM_J},$$

die sich mit Hilfe der Variablentransformation $x = \cos\vartheta$ umformen läßt auf

$$\sqrt{1-x^2}\,\frac{dP_{kJM_J}(x)}{dx} + \frac{M_J - kx}{\sqrt{1-x^2}}\,P_{kJM_J}(x) = -i\alpha_k P_{k-1,JM_J}(x)$$

mit

$$P_{kJM_J}(x) = \Theta_{kJM_J}(\mathrm{arc\,cos}\,x).$$

Setzen wir

$$P_{kJM_J} = (1-x)^{-(k-M_J)/2}\,(1+x)^{-(k+M_J)/2}\,v_{kJM_J}, \tag{5}$$

so finden wir eine einfache Relation für v_{kJM_J}:

$$\frac{dv_{kJM_J}}{dx} = -i\alpha_k v_{k-1,JM_J}. \tag{6}$$

Die oben gewonnenen Funktionen P_{JJM_J} [siehe (3)] können in der Form (5) geschrieben werden:

$$P_{JJM_J}(x) = (1-x)^{-(J-M_J)/2}\,(1+x)^{-(J+M_J)/2}\,v_{JJM_J},$$

wobei

$$v_{JJM_J}(x) = c(1-x)^{J-M_J}\,(1+x)^{J+M_J} \tag{7}$$

ist. Aus (7) und der Rekursionsformel (6) folgt

$$v_{kJM_J} = c\,\frac{d^{J-k}}{dx^{J-k}}\left\{(1-x)^{J-M_J}\,(1+x)^{J+M_J}\right\}.$$

Folglich gilt

$$\Phi_{kJM_J}(\vartheta,\psi,\varphi) = c\,\mathrm{e}^{ik\varphi}\,\mathrm{e}^{iM_J\psi}(1-\cos\vartheta)^{-(k-M_J)/2}(1+\cos\vartheta)^{-(k+M_J)/2}$$
$$\times\left(\frac{d}{d\cos\vartheta}\right)^{J-k}\left\{(1-\cos\vartheta)^{J-M_J}\,(1+\cos\vartheta)^{J+M_J}\right\},$$

wobei diese verallgemeinerten Kugelfunktionen für $M_J = 0$ erwartungsgemäß in gewöhnliche Kugelfunktionen übergehen und die Wellenfunktionen des Rotators darstellen:

$$\Phi_{kJ0}(\vartheta, \varphi) = c\, e^{ik\varphi} \frac{1}{\sin^k \vartheta} \frac{d^{J-k}}{(d\cos\vartheta)^{J-k}} (\sin^{2J} \vartheta).$$

8.20.

$$H_{kk} = \frac{\hbar^2}{4}\left(\frac{1}{A} + \frac{1}{B}\right)\{J(J+1) - k^2\} + \frac{\hbar^2 k^2}{2c},$$

$$H_{k,k+2} = H_{k+2,k}$$

$$= \frac{\hbar^2}{8}\left(\frac{1}{A} - \frac{1}{B}\right)\sqrt{(J-k)(J-k-1)(J+k+1)(J+k+2)}.$$

8.21. Im Falle eines unsymmetrischen Kreisels ist noch eine Entartung bezüglich der Richtungen des Drehimpulses im raumfesten System vorhanden. Es gibt keine Entartung bezüglich der Quantenzahl k; denn einem vorgegebenen J entsprechen $2J + 1$ verschiedene Niveaus. Im Falle $J = 1$ ergeben sich die Energieniveaus durch Lösung der Säkulargleichung

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{10} & H_{1,-1} \\ H_{10} & H_{00} - E & H_{0,-1} \\ H_{-1,1} & H_{-1,0} & H_{-1,-1} - E \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} H_{11} - E & 0 & H_{1,-1} \\ 0 & H_{00} - E & 0 \\ H_{-1,1} & 0 & H_{-1,-1} - E \end{vmatrix} = 0.$$

Wegen $H_{-1,-1} = H_{11}$ ist

$$(H_{00} - E)(H_{11}^2 + E^2 - 2H_{11}E - H_{1,-1}^2) = 0,$$

woraus folgt

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{A} + \frac{1}{B}\right), \quad E_2 = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{C} + \frac{1}{A}\right), \quad E_3 = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{B} + \frac{1}{C}\right).$$

8.22.

E		m	
E_1	$\Phi_{k=0,m}$	1	$\frac{\sqrt{3}}{4\pi} e^{i\varphi} \sin\vartheta$
		0	$\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{3}{8}} \cos\vartheta$
		-1	$\frac{\sqrt{3}}{4\pi} e^{-i\varphi} \sin\vartheta$
E_2	$c(\Phi_{k=1,m} + \Phi_{k=-1,m})$	1	$\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{3}{16}} e^{i\varphi} (\cos\varphi + i\cos\vartheta\sin\varphi)$
		0	$\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{3}{8}} \cos\varphi \sin\vartheta$
		-1	$\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{3}{16}} e^{-i\varphi} (\cos\varphi - i\cos\vartheta\sin\varphi)$
E_3	$c(\Phi_{k=1,m} - \Phi_{k=-1,m})$	1	$\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{3}{16}} e^{i\varphi} (\cos\vartheta\cos\varphi + i\sin\varphi)$
		0	$\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{3}{8}} \sin\vartheta \sin\varphi$
		-1	$\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{3}{16}} e^{-i\varphi} (-\cos\vartheta\cos\varphi + i\sin\varphi)$

8.24. Die Aufspaltung der Terme wird durch die Spin-Spin-Wechselwirkung verursacht. Zur Bestimmung der Aufspaltung muß man den Mittelwert des Operators $\alpha(\mathfrak{S}\mathfrak{n})^2$ der Spin-Spin-Wechselwirkung im Rotationszustand kennen. Bei vorgegebenem K nimmt die Quantenzahl J die Werte

$$J = K + 1, \quad K, \; K - 1$$

an. Die nichtverschwindenden Matrixelemente von $(\mathfrak{n}\mathfrak{S})$ sind

$$(\mathfrak{n}\mathfrak{S})_{K\;\;J=K}^{K-1\;J=K} = (\mathfrak{n}\mathfrak{S})_{K-1\;J=K}^{K\;\;J=K} = \sqrt{\frac{K+1}{2K+1}},$$

$$(\mathfrak{n}\mathfrak{S})_{K\;\;J=K}^{K+1\;J=K} = (\mathfrak{n}\mathfrak{S})_{K+1\;J=K}^{K\;\;J=K} = \sqrt{\frac{K}{2K+1}},$$

$$(\mathfrak{n}\mathfrak{S})_{K+1\;J=K+1}^{K\;\;J=K+1} = (\mathfrak{n}\mathfrak{S})_{K\;\;J=K+1}^{K+1\;J=K+1} = \sqrt{\frac{K+2}{2K+3}},$$

$$(\mathfrak{n}\mathfrak{S})_{K-1\;J=K-1}^{K\;\;J=K-1} = (\mathfrak{n}\mathfrak{S})_{K\;\;J=K-1}^{K-1\;J=K-1} = \sqrt{\frac{K-1}{2K-1}}.$$

Mit Hilfe dieser Beziehungen finden wir die Aufspaltung der Tripletterme:

$$\Delta E_{J=K+1} = \frac{K+2}{2K+3}\alpha, \quad \Delta E_{J=K} = \alpha, \quad \Delta E_{J=K-1} = \frac{K-1}{2K-1}\alpha.$$

8.25. Zunächst bestimmen wir die nichtdiagonalen Matrixelemente des Operators w

$$\{w\}^{n\Lambda\Omega vJ}_{n\Lambda\Omega' vJ'}.$$

Man sieht sofort, daß nur diejenigen Matrixelemente von Null verschieden sind, welche Übergängen mit $\Omega' = \Omega \pm 1$, $J = J'$ entsprechen. Aus

$$\{M_\xi\}^{n\Lambda\Omega}_{n\Lambda,\Omega\pm 1} = \mp i\{M_\eta\}^{n\Lambda\Omega}_{n\Lambda,\Omega\pm 1}$$

folgt

$$\{w\}^{n\Lambda\Omega vJ}_{n\Lambda,\Omega\pm 1,vJ} = \frac{\hbar^2}{M}\left\{\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{i}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + (\Omega\pm 1)\cot\vartheta\right\}^{\Lambda\Omega J}_{\Lambda,\Omega\pm 1,J} \times \left\{\frac{1}{\varrho^2}M_\eta\right\}^{n\Lambda\Omega v}_{n\Lambda,\Omega\pm 1,v}.$$

Zur Berechnung des Matrixelementes

$$\left\{\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{i}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + (\Omega\pm 1)\cot\vartheta\right\}^{\Lambda\Omega J}_{\Lambda,\Omega\pm 1,J}$$

benutzen wir die Tatsache, daß aus dem in der Aufgabe 8.13. für den Operator $J_\xi + iJ_\eta$ erhaltenen Ausdruck für $\varphi = 0$ und $-i\frac{\partial}{\partial\varphi} \to M_\zeta$ folgt

$$(J_\xi \pm iJ_\eta)_{\substack{\varphi\to 0\\ -i\frac{\partial}{\partial\varphi}\to M_\zeta}} = \mp i\left\{\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{i}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + (\Omega\pm 1)\cot\vartheta\right\}.$$

Damit erhalten wir

$$\left\{\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{i}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} + (\Omega\pm 1)\cot\vartheta\right\}^{\Lambda\Omega J}_{\Lambda,\Omega\pm 1,J} = \pm i\sqrt{(J\mp\Omega)(J\pm\Omega+1)}.$$

Im Falle kleiner Schwingungen um die Gleichgewichtslage ist das Matrixelement

$$\left\{\frac{1}{\varrho^2}M_\eta\right\}^{n\Lambda\Omega v}_{n\Lambda,\Omega\pm 1,v}$$

näherungsweise gleich

$$\frac{1}{\varrho_0^2}\{M_\eta\}_{n\Lambda,\,\Omega\pm 1}^{n\Lambda\Omega},$$

wobei ϱ_0 den Abstand zwischen den Kernen in der Gleichgewichtslage bezeichnet. Mit Hilfe von

$$\{L_\eta + S_\eta\}_{n\Lambda,\,\Omega\pm 1}^{n\Lambda\Omega} = \{M_\eta\}_{n\Lambda,\,\Omega\pm 1}^{n\Lambda\Omega} = \pm\frac{i}{2}\sqrt{S(S+1) - \Sigma(\Sigma\pm 1)}$$

erhalten wir schließlich

$$\{W\}_{n\Lambda,\,\Omega\pm 1,\,vJ}^{n\Lambda\Omega vJ} = B_0\sqrt{S(S+1) - \Sigma(\Sigma\pm 1)}\sqrt{J(J+1) - (\Lambda+\Sigma)(\Lambda+\Sigma\pm 1)}.$$

Dabei ist $B_0 = \hbar^2/2M\varrho_0^2$ der Wert der Rotationskonstante im Gleichgewichtszustand, welchem $\varrho = \varrho_0$ entspricht.

Im allgemeinen kann die Dublettaufspaltung von derselben Größenordnung wie die berechneten Matrixelemente sein. Bei der Berechnung der Niveauverschiebungen des Dubletterms benutzen wir die Störungstheorie deshalb in modifizierter Form. Als nullte Näherung wählen wir statt der Funktionen

$$\psi_{n\Lambda,\,\Lambda+\frac{1}{2},\,vJ}, \quad \psi_{n\Lambda,\,\Lambda-\frac{1}{2},\,vJ}$$

die Linearkombination

$$\psi = c_1\psi_{n\Lambda,\,\Lambda+\frac{1}{2},\,vJ} + c_2\psi_{n\Lambda,\,\Lambda-\frac{1}{2},\,vJ}.$$

Setzen wir diesen Ausdruck in die störungstheoretische Gleichung ein und verfahren in der üblichen Weise, so erhalten wir die Säkulargleichung

$$\begin{vmatrix} E^{(0)}_{n\Lambda,\,\Lambda+\frac{1}{2},\,vJ} - E & W^{n\Lambda,\,\Lambda+\frac{1}{2},\,vJ}_{n\Lambda,\,\Lambda-\frac{1}{2},\,vJ} \\ W^{n\Lambda,\,\Lambda-\frac{1}{2},\,vJ}_{n\Lambda,\,\Lambda+\frac{1}{2},\,vJ} & E^{(0)}_{n\Lambda,\,\Lambda-\frac{1}{2},\,vJ} - E \end{vmatrix} = 0.$$

Durch Lösung dieser Gleichung folgt

$$E = \frac{1}{2}E^{(0)} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Delta E^{(0)} + 4B_0^2\{(J+\tfrac{1}{2})^2 - \Lambda^2\}}, \tag{1}$$

wobei

$$E^{(0)} = E^{(0)}_{n\Lambda,\,\Lambda+\frac{1}{2},\,vJ} + E^{(0)}_{n\Lambda,\,\Lambda-\frac{1}{2},\,vJ},$$

$$\Delta E^{(0)} = E^{(0)}_{n\Lambda,\,\Lambda+\frac{1}{2},\,vJ} - E^{(0)}_{n\Lambda,\,\Lambda-\frac{1}{2},\,vJ}.$$

Im Kopplungsfall a, in dem die Multiplettaufspaltung groß gegen den Abstand zwischen zwei benachbarten Rotationsniveaus ist, folgt aus der Gl. (1), daß

näherungsweise gilt

$$E_1 = E^{(0)}_{nA,\,A+\frac{1}{2},\,vJ} + \frac{B_0^2\{(J+\frac{1}{2})^2 - A^2\}}{\Delta E^{(0)}},$$

$$E_2 = E^{(0)}_{nA,\,A-\frac{1}{2},\,vJ} - \frac{B_0^2\{(J+\frac{1}{2})^2 - A^2\}}{\Delta E^{(0)}}.$$

Im Kopplungsfall b erhalten wir aus (1)

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} E^{(0)} \pm B_0 \left\{\left(J + \frac{1}{2}\right)^2 - A^2\right\} \pm \frac{\Delta E^{(0)}}{8B_0\{(J+\frac{1}{2})^2 - A^2\}}.$$

8.26. Wir erhalten

$K = 0, 2, 4, \ldots$ für den Gesamtspin $S = 2$ oder $S = 0$,

$K = 1, 3, 5, \ldots$ für den Gesamtspin $S = 1$.

8.27. Das magnetische Moment des Moleküls ist durch

$$\frac{e\hbar}{2mc}(A + 2\Sigma)\,\mathfrak{n}$$

gegeben, wobei $\mathfrak{n}$ der Einheitsvektor in Richtung der Molekülachse ist.

Zur Bestimmung der Energieaufspaltung haben wir den Mittelwert der Größe

$$-\frac{e\hbar}{2mc}(A + 2\Sigma)\,\mathfrak{n}\mathfrak{H}$$

im Rotationszustand, d. h. die Matrixelemente

$$(\mathfrak{n})^{JM_J}_{JM_J}$$

zu bestimmen. $\mathfrak{J}$ ist der einzige Vektor, der eine Konstante der Bewegung ist. Daher werden die Matrixelemente des Vektors $\mathfrak{n}$ denjenigen von $\mathfrak{J}$ proportional sein:

$$(\mathfrak{n})^{JM'_J}_{JM_J} \sim (\mathfrak{J})^{JM'_J}_{JM_J}.$$

Betrachtet man $\mathfrak{n}$ als Operator, so hat man

$$\mathfrak{n} = \text{const} \cdot \mathfrak{J}.$$

Um die Konstante zu bestimmen, multiplizieren wir diese Beziehung von links und von rechts mit $\mathfrak{J}$. Da $\mathfrak{J}^2$ die Eigenwerte $J(J+1)$ und $\mathfrak{J}\mathfrak{n}$ die Eigen-

werte Ω besitzt, folgt

$$\mathfrak{n} = \frac{\Omega}{J(J+1)} \mathfrak{J}.$$

Daher lautet der Störoperator

$$-\frac{e\hbar}{2mc}(\Lambda + 2\Sigma)\frac{\Omega}{J(J+1)} \mathfrak{H}\mathfrak{J}.$$

Berechnen wir die Diagonalmatrixelemente, so erhalten wir die Energiedifferenz zwischen den aufgespaltenen Niveaus:

$$\Delta E_{M_J} = -\frac{e\hbar H}{2mc}(\Lambda + 2\Sigma)\frac{\Omega}{J(J+1)} M_J.$$

8.28. Wie man leicht sieht, lautet der Störoperator im betrachteten Fall

$$-\frac{e\hbar}{2mc}\mathfrak{H}\left\{\frac{\Lambda^2}{K(K+1)}\mathfrak{K} + 2\mathfrak{S}\right\}.$$

Daraus ergibt sich die ZEEMAN-Aufspaltung

$$\Delta E_{M_J} = -M_J\frac{e\hbar H}{2mc}\left\{\Lambda^2\frac{J(J+1) - S(S+1) + K(K+1)}{2K(K+1)\,J(J+1)} + \frac{J(J+1) + S(S+1) - K(K+1)}{J(J+1)}\right\}.$$

8.29. Die ZEEMAN-Aufspaltung beträgt

$$\Delta E_{M_K M_S} = -\frac{e\hbar}{2mc} H\left[\frac{\Lambda^2}{K(K+1)} M_K + 2M_S\right].$$

8.30. Da die Wechselwirkungsenergie des magnetischen Moments mit dem äußeren Magnetfeld und die Energie der Spin-Achsen-Kopplung von derselben Größenordnung sind, müssen beide bei Anwendung der Störungstheorie gleichzeitig berücksichtigt werden. Der Störoperator besitzt die Form

$$V = A\mathfrak{n}\mathfrak{S} - \mu_0 \Lambda \mathfrak{n}\mathfrak{H} - 2\mu_0\mathfrak{S}\mathfrak{H}.$$

Als Wellenfunktionen der nullten Näherung wählen wir die Wellenfunktionen der Zustände, in denen der Drehimpuls K und die Komponenten von $\mathfrak{K}$ und $\mathfrak{S}$ in Magnetfeldrichtung definierte Werte besitzen. Wir nehmen an, daß die Richtung der z-Achse mit der Magnetfeldrichtung übereinstimmt. Da die Komponente des Gesamtdrehimpulses in Magnetfeldrichtung eine Konstante

der Bewegung ist, müssen wir für den Dubletterm die Störungstheorie für den Fall zweifacher Entartung benutzen. Man erhält folgende Matrixelemente des Störoperators:

$$V_{M_K,-\frac{1}{2}}^{M_K,-\frac{1}{2}} = -M_K \frac{A}{2K(K+1)} A - M_K \frac{\Lambda^2}{K(K+1)} \mu_0 H + \mu_0 H,$$

$$V_{M_K-1,\frac{1}{2}}^{M_K-1,\frac{1}{2}} = (M_K - 1) \frac{\Lambda}{2K(K+1)} A$$

$$- (M_K - 1) \frac{\Lambda^2}{K(K+1)} \mu_0 H - \mu_0 H,$$

$$V_{M_K-1,\frac{1}{2}}^{M_K,-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} A (n_x + i n_y)_{M_K-1}^{M_K}$$

$$= \frac{1}{2} A \frac{\Lambda}{K(K+1)} \sqrt{(K-M+1)(K+M)},$$

$$V_{M_K,-\frac{1}{2}}^{M_K-1,\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} A (n_x - i n_y)_{M_K}^{M_K-1}$$

$$= \frac{1}{2} A \frac{\Lambda}{K(K+1)} \sqrt{(K-M+1)(K+M)}.$$

Durch Lösung der Säkulargleichung ergibt sich

$$E_{1,2}^{(1)} = \frac{\Lambda^2}{K(K+1)} \left(M_K - \frac{1}{2}\right) \mu_0 H - \frac{A\Lambda}{4K(K+1)} \pm \frac{1}{2K(K+1)}$$

$$\times \left[\{A\Lambda(M - \tfrac{1}{2}) - \Lambda^2 \mu_0 H + 2\mu_0 H(K+1) K\}^2 + A^2 \Lambda^2 (K + M_K)(K - M_K + 1)\right]^{1/2}.$$

Wir untersuchen die Grenzfälle. Für $\mu_0 H \gg A$ erhalten wir

$$E_{1,2}^{(1)} = -\frac{\Lambda^2}{K(K+1)} \left\{M_K - \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right\} \mu_0 H \mp \mu_0 H$$

in Übereinstimmung mit der in der Aufgabe 8.29. gewonnenen Formel.

Für $A \gg \mu_0 H$ folgt

$$E_1^{(1)} = \frac{A\Lambda}{2(K+1)} - \left(M_K - \frac{1}{2}\right) \left\{\frac{\Lambda^2}{(K+1)(K+\frac{1}{2})} + \frac{1}{K+\frac{1}{2}}\right\} \mu_0 H,$$

$$E_2^{(1)} = -\frac{A\Lambda}{2K} - \left(M_K - \frac{1}{2}\right) \left\{\frac{\Lambda^2}{K(K+\frac{1}{2})} - \frac{1}{K+\frac{1}{2}}\right\} \mu_0 H.$$

Die zweiten Terme in den letzten Formeln, d. h. die linear von H abhängigen Terme, stimmen mit den entsprechenden Ausdrücken überein, die sich ergeben, wenn man in der in Aufgabe 8.28. gewonnenen Formel

$$J = K \pm \tfrac{1}{2}, \quad S = \tfrac{1}{2} \quad \text{und} \quad M_J = M_K - \tfrac{1}{2}$$

setzt.

8.31. Wegen der axialen Symmetrie besitzt das Dipolmoment des Moleküls die Richtung der Verbindungsgeraden zwischen den Kernen:

$$\mathfrak{p} = p\mathfrak{n}.$$

Verfährt man so wie bei der Lösung der Aufgabe 8.27., so findet man

$$\Delta E_{M_J} = -|\mathfrak{E}|\, p \frac{\Omega}{J(J+1)} M_J.$$

8.32. Es ergibt sich

$$\Delta E_{M_J} = -|\mathfrak{E}|\, p M_J \Lambda \frac{J(J+1) - S(S+1) + K(K+1)}{2K(K+1)\, J(J+1)}.$$

8.33. In erster Näherung verschwindet die Energiekorrektion. Wie wir wissen, finden wir die Energiekorrektion in zweiter Näherung im Falle der Entartung aus der Bedingung, daß das System homogener linearer Gleichungen

$$E_n^{(2)} c_{n\beta}^{(0)} = \sum_j c_{nj}^{(0)} \sum_{m,\alpha} \frac{V_{m\alpha}^{n\beta} V_{nj}^{m\alpha}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

eine nichtverschwindende Lösung besitzt. In unserem Fall ergibt sich

$$E_{lm}^{(2)} = \frac{p^2 |\mathfrak{E}|^2 A}{\hbar^2} \left\{ \frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)\, l} - \frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l+1)(l+1)} \right\}.$$

Die Energie eines starren Dipols beträgt daher

$$E_{lm} = \frac{\hbar^2}{2A} l(l+1) + E_{lm}^{(2)},$$

$$E_{00} = -\frac{1}{3} \frac{Ap^2 |\mathfrak{E}|^2}{\hbar^2} \quad (l = 0).$$

Dieses Resultat ist in gewisser Hinsicht paradox. In der Tat ist die Energie eines starren Dipols nach der letzten Beziehung nicht $|\mathfrak{E}|$, sondern $|\mathfrak{E}|^2$ proportional. Daher kann man dem starren Dipol formal eine bestimmte „Polarisierbarkeit“ zuordnen.

Wir betrachten den Fall $l = 1$. Die Energie des Niveaus mit $m = 0$ ist im elektrischen Feld größer als im feldfreien Fall, so daß sich das Molekül verhält, als besäße es negative Polarisierbarkeit. Das Molekül verhält sich wie ein diamagnetischer Körper im Magnetfeld. Ein Molekül, das sich im Zustand mit $m = \pm 1$ befindet, verhält sich „normal". Das elektrische Feld hebt die Entartung nur teilweise auf, da die Energie nur vom Absolutwert der magnetischen Quantenzahl abhängt.

Wir bemerken, daß

$$\sum_{m=-l}^{m=+l} E_{lm}^{(2)} = 0$$

gilt.

8.34. Für große Werte von R kann man die Austauscheffekte vernachlässigen, d. h., man kann annehmen, daß sich das erste Elektron beim Kern a und das zweite Elektron beim Kern b befindet (Abb. 31).

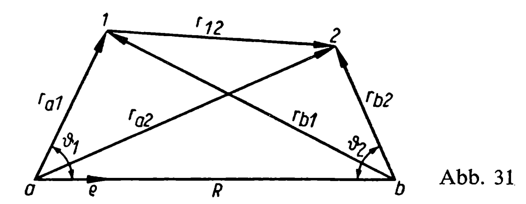


Abb. 31

Wir werden die Wechselwirkung zwischen den beiden Atomen

$$V = \frac{1}{R} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{12}} \tag{1}$$

als kleine Störung auffassen.

In erster Näherung ist die Wechselwirkungsenergie der beiden Atome gleich den Diagonalmatrixelementen von V:

$$\int \psi_0(r_{1a})\, \psi_0(r_{2b})\, V \psi_0(r_{1a})\, \psi_0(r_{2b})\, d\tau_1\, d\tau_2$$

mit

$$\psi_0(r_{1a}) = 2\mathrm{e}^{-r_{1a}}, \quad \psi_0(r_{2b}) = 2\mathrm{e}^{-r_{2b}}.$$

Im S-Zustand verschwinden die Diagonalelemente, d. h. die Mittelwerte des Dipol- und Quadrupolmomentes sowie aller höheren Momente. Zur Berechnung der Wechselwirkungsenergie haben wir also die zweite störungstheoretische Näherung zu betrachten.

Im Störoperator (1) beschränken wir uns auf die Dipol-Dipol-Wechselwirkung als die mit dem Abstand am schwächsten abnehmende Wechsel-

wirkung. Um den Operator der Dipol-Dipol-Wechselwirkung zu erhalten, entwickeln wir das Potential V nach fallenden Potenzen von R. Die Entwicklung lautet in Kugelkoordinaten

$$\frac{1}{r_{b1}} = \frac{1}{|R\vec{\varrho} - \mathfrak{r}_{1a}|} = \sum_{\lambda=0} \frac{r_{a1}^{\lambda}}{R^{\lambda+1}} P_\lambda(\cos\vartheta)$$

$$= \frac{1}{R} + \frac{\mathfrak{r}_{a1}\vec{\varrho}}{R^2} + \frac{3(\mathfrak{r}_{a1}\vec{\varrho})^2 - \mathfrak{r}_{a1}^2}{2R^3} + \cdots,$$

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{|R\vec{\varrho} + \mathfrak{r}_{b2} - \mathfrak{r}_{a1}|}$$

$$= \frac{1}{R} + \frac{(\mathfrak{r}_{a1} - \mathfrak{r}_{b2}, \vec{\varrho})}{R^2} + \frac{3(\mathfrak{r}_{a1} - \mathfrak{r}_{b2}, \vec{\varrho})^2 - (\mathfrak{r}_{a1} - \mathfrak{r}_{b2})^2}{2R^3} + \cdots,$$

$$\frac{1}{r_{a2}} = \frac{1}{R} + \frac{(\mathfrak{r}_{b2}\vec{\varrho})}{R^2} + \frac{3(\mathfrak{r}_{b2}\vec{\varrho})^2 - \mathfrak{r}_{b2}^2}{2R^3} + \cdots$$

Setzen wir diese Entwicklungen in V ein, so erhalten wir für die Dipol-Dipol-Wechselwirkung den Ausdruck

$$V = -\frac{2z_1z_2 - x_1x_2 - y_1y_2}{R^3}, \tag{2}$$

wobei die z-Achse die Richtung der Verbindungsgeraden zwischen den Kernen hat. Wie wir oben feststellten, verschwindet der Mittelwert von (2) über die ungestörte Eigenfunktion $\psi = \psi_0(r_{a1})\,\psi_0(r_{b2})$. Die Nichtdiagonalelemente von (2), welche Übergängen aus dem Grundzustand in angeregte Zustände entsprechen, können in der Form

$$V_{00}^{mn} = -\frac{2z_{0m}\,z_{0n} - x_{0m}x_{0n} - y_{0m}y_{0n}}{R^3}$$

dargestellt werden. Auf Grund der Auswahlregel sind die Matrixelemente z_{0n}, x_{0n}, y_{0n} nur für Übergänge aus dem Grundzustand in die Zustände

$$\psi_n(r)\cos\vartheta, \quad \psi_n(r)\sin\vartheta\cos\varphi$$

von Null verschieden, wobei die drei Matrixelemente einander gleich sind. Die Wechselwirkungsenergie beträgt in zweiter Näherung

$$E^{(2)} = \sum_{m,n} \frac{(V_{00}^{mn})^2}{2E_0 - E_m - E_n} = \frac{1}{R^6} \sum_{m,n} \frac{4z_{0m}^2 z_{0n}^2 + x_{0m}^2 x_{0n}^2 + y_{0m}^2 y_{0n}^2}{2E_0 - E_m - E_n}$$

oder

$$E^{(2)} = \frac{6}{R^6} \sum_{m,n} \frac{z_{0m}^2 z_{0n}^2}{2E_0 - E_m - E_n}. \tag{3}$$

Wegen $E_0 < E_m$ und $E_0 < E_n$ ist $E^{(2)}$ negativ. Daher ziehen sich zwei Atome, die sich im nichtangeregten Zustand befinden und weit voneinander entfernt sind, mit einer Kraft an, die der siebenten Potenz des Abstandes proportional ist. Um die Summe in (3) näherungsweise zu berechnen, benutzen wir die Tatsache, daß die Energiedifferenzen zwischen den verschiedenen angeregten Niveaus klein gegen die Energiedifferenzen zwischen den angeregten Niveaus und dem Grundzustand sind. Daher kann man für (3) näherungsweise schreiben

$$E^{(2)} = \frac{3}{R^6} \sum_m z_{0m}^2 \sum_n \frac{z_{0n}^2}{E_0 - E_n}.$$

Aus der Theorie des quadratischen STARK-Effektes folgt

$$\sum \frac{z_{0n}^2}{E_0 - E_n} = -\frac{1}{2}\alpha,$$

wobei α die Polarisierbarkeit des Atoms bezeichnet. Für den Grundzustand des Wasserstoffatoms haben wir $\alpha = 4{,}5$ at. Einh. Bei der Berechnung der Summe $\sum_{m \neq 0} z_{0m}^2$ benutzen wir die Regel der Matrizenmultiplikation

$$(AB)_{nk} = \sum_m A_{nm} B_{mk}$$

bzw.

$$\int \psi_n^* (AB)\, \psi_k \, d\tau = \sum_m \left\{ \int \psi_n^* A \psi_m \, d\tau \int \psi_m^* B \psi_k \, d\tau \right\}.$$

Setzen wir in der letzten Relation $A = B = z$ und $n = k = 0$, so erhalten wir

$$(z^2)_{00} = \sum_m z_{0m} z_{m0} = \sum z_{0m}^2$$

oder

$$\sum_{m \neq 0} z_{0m}^2 = \sum_m z_{0m}^2 - z_{00}^2 = (z^2)_{00} - z_{00}^2.$$

Da im S-Zustand aus Symmetriegründen $z_{00} = 0$, $(z^2)_{00} = {}^1/_3 (r^2)_{00}$ gilt, folgt

$$\sum_{m \neq 0} z_{0m}^2 = \frac{1}{3}(r^2)_{00} = 1.$$

Wir erhalten schließlich

$$V(r) = -\frac{6{,}75}{R^6}.$$

Um die Entstehung der Wechselwirkungskraft zwischen zwei neutralen kugelsymmetrischen Wasserstoffatomen zu erklären, betrachten wir die

Wellenfunktion des Systems, für die wir in erster Näherung

$$\psi = \psi_0(r_{a1})\,\psi_0(r_{b2})\left[1 + \frac{1}{2E_0\,R^3}(x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2)\right]$$

erhalten. Vernachlässigen wir die Terme, die den Faktor $1/R^6$ enthalten, so besitzt die Wahrscheinlichkeitsdichte $w(1, 2)$ die Form

$$w(r_{a1}, r_{b2}) = w_0(r_{a1})\,w_0(r_{b2})\left[1 + \frac{1}{E_0R^3}(x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2)\right].$$

Besteht zwischen den Atomen keine Wechselwirkung, so ist die Wahrscheinlichkeitsdichte einfach gleich dem Produkt von $w(1)$ mit $w(2)$, d. h., in diesem Fall gibt es keinerlei Korrelation zwischen den Elektronen. Ist jedoch eine Wechselwirkung vorhanden, so ist die Lage des ersten Elektrons nicht unabhängig von der Lage des zweiten. Statistisch gesprochen befinden sich die Elektronen häufiger an solchen Orten, an denen ihre gegenseitige potentielle Energie am kleinsten ist.

Man kann die Wechselwirkungskräfte also in erster Näherung nicht durch Deformationen der Elektronenschalen, sondern durch die Ortskorrelation der Elektronen erklären.

8.35. Wir werden zeigen, daß ein aus drei Atomen bestehendes System die Eigenschaft der Additivität besitzt, und erkennen, daß sich die Rechnung auf eine beliebige Zahl von Atomen verallgemeinern läßt. Man kann die Wechselwirkungsenergie schreiben

$$V = V(1, 2) + V(2, 3) + V(3, 1),$$

wobei mit 1, 2 und 3 die Koordinaten des ersten, zweiten und dritten Atoms bezeichnet sind. Wir betrachten nun die Wechselwirkung zwischen Atomen, die so weit voneinander entfernt sind, daß die Austauschkräfte vernachlässigt werden können. Die Wellenfunktion der drei Atome in nullter Näherung wählen wir in diesem Fall in der Form

$$\psi = \psi_{ai}(1)\,\psi_{bk}(2)\,\psi_{cl}(3),$$

wobei i, k, l die Quantenzustände der Atome a, b, c charakterisieren. Die Funktionen $\psi_{ai}(1)$ sind für verschiedene i zueinander orthogonal. Entsprechendes gilt für die Funktionen $\psi_{bk}(2)$ und $\psi_{cl}(3)$.

In zweiter Näherung beträgt die Störungsenergie

$$\varepsilon = V_{000}^{000} + \sum_{ikl}{}' \frac{|V_{ikl}^{000}|^2}{E_{a0} + E_{b0} + E_{c0} - E_{ai} - E_{bk} - E_{cl}}. \tag{1}$$

Der Strich am Summenzeichen bedeutet, daß i, k und l nicht gleichzeitig gleich Null sein dürfen. Der erste Term stellt die klassische Multipolwechselwirkung dar. In unserem Fall verschwindet dieser Term. Alle Terme in (1), in denen gleichzeitig $i \neq 0, k \neq 0, l \neq 0$ ist, sind auf Grund der Orthogonalität der Funktionen gleich Null.

Die drei Partialsummen mit $i = k = 0,\ l \neq 0;\ i = l = 0,\ k \neq 0$ und $k = l = 0,\ i \neq 0$ bedeuten die Polarisationswechselwirkung des l-ten, k-ten und i-ten Atoms im resultierenden Feld der beiden anderen Atome. Diese Summen verschwinden, wenn die Ladungsverteilungen in den Atomen kugelsymmetrisch sind. Wir weisen darauf hin, daß diese Summen nicht durch Addieren der Wechselwirkungsenergien aller Paare von Atomen gewonnen werden können. Wir haben noch die Terme zu betrachten, in denen zwei Indizes ungleich Null sind. Mit Rücksicht auf unsere Annahmen über die Ladungsverteilungen in den Atomen können wir die Wechselwirkungsenergie in drei Partialsummen zerlegen:

$$\begin{aligned} \varepsilon = & \sum_{i \neq 0, k \neq 0}' \frac{|V_{ik0}^{000}|^2}{E_{a0} + E_{b0} - E_{ai} - E_{bk}} \\ & + \sum_{k \neq 0, l \neq 0}' \frac{|V_{0kl}^{000}|^2}{E_{b0} + E_{c0} - E_{bk} - E_{cl}} \\ & + \sum_{i \neq 0, l \neq 0}' \frac{|V_{i0l}^{000}|^2}{E_{a0} + E_{c0} - E_{ai} - E_{cl}}. \end{aligned} \tag{2}$$

Wegen der Orthonormalitätsbeziehungen für die Eigenfunktionen des Atoms erhalten wir das Matrixelement

$$\begin{aligned} V_{ik0}^{000} &= \int \psi_{a0}^*(1)\, \psi_{b0}^*(2)\, \psi_{c0}^*(3)\, \{V(1,2) + V(2,3) + V(3,1)\} \\ &\quad \times \psi_{ai}(1)\, \psi_{bk}(2)\, \psi_{c0}(3)\, d\tau_1\, d\tau_2 \\ &= \int \psi_{a0}^*(1)\, \psi_{b0}^*(2)\, V(1,2)\, \psi_{ai}(1)\, \psi_{bk}(2)\, d\tau_1\, d\tau_2 = \{V(1,2)\}_{ik}^{00}. \end{aligned}$$

Folglich besteht der Ausdruck (2) aus drei Termen, von denen jeder die Dispersionswechselwirkung zwischen zwei Atomen beschreibt. Wie man leicht sieht, kann man die durchgeführte Rechnung auf eine beliebige Zahl von Atomen verallgemeinern.

Bei kleinen Abständen zwischen den Atomen müssen die Übergänge der Elektronen von einem Atom zu einem anderen, d. h. die Austauschkräfte, berücksichtigt werden.

9. STREUUNG

9.1. Die potentielle Energie des Teilchens ist

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{für} \quad r < a, \\ 0 & \text{für} \quad r > a. \end{cases}$$

Wir müssen die Streuphasen bestimmen, d. h. die asymptotische Form der radialen Funktionen, die den Gleichungen

$$\chi_l'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l = 0, \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} \qquad \text{für} \quad r > a,$$

$$\chi_l'' + \left[k'^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l = 0, \quad k'^2 = \frac{2\mu(E + U_0)}{\hbar^2} \quad \text{für} \quad r < a$$

und der Randbedingung

$$\chi_l(0) = 0$$

genügen.

Ist die DE-BROGLIE-Wellenlänge groß gegen die Abmessungen des Topfes, so rührt der Hauptbeitrag zur Streuung von der S-Welle her. Die der Randbedingung genügende Lösung χ_0 besitzt die Form

$$\chi_0 = A \sin k'r \qquad \text{für} \quad r < a,$$

$$\chi_0 = \sin(kr + \delta_0) \quad \text{für} \quad r > a.$$

Die Streuphase δ_0 und der Koeffizient A werden aus der Stetigkeitsforderung an die Wellenfunktion und ihre erste Ableitung bei $r = a$ bestimmt. Wir erhalten

$$\delta_0 = \arctan\left(\frac{k}{k'} \tan k'a\right) - ka.$$

Der Partialquerschnitt für $l = 0$ beträgt daher

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \left[\arctan\left(\frac{k}{k'} \tan k'a\right) - ka\right]. \tag{1}$$

Besitzen die einfallenden Teilchen geringe Geschwindigkeiten ($k \to 0$), so ist die Streuphase δ_0 proportional zu k:

$$\delta_0 \approx ka\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a} - 1\right), \quad k_0^2 = \frac{2\mu U_0}{\hbar^2}. \tag{2}$$

Wegen des Faktors $1/k^2$ ist der Wirkungsquerschnitt σ_0 ungleich Null:

$$\sigma_0 \approx 4\pi a^2 \left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a} - 1\right)^2 \quad (k \text{ klein}). \tag{3}$$

Wir betrachten den Wirkungsquerschnitt σ_0 als Funktion der Topftiefe, die wir durch k_0 charakterisieren. Bei kleiner Topftiefe ($k_0 a \ll 1$) gilt

$$\sigma_0 = 4\pi\, a^2 \frac{k_0^4 a^4}{9} = \frac{16\pi}{9} \frac{a^6 U_0^2 \mu^2}{\hbar^4}.$$

Nach der Störungstheorie gilt

$$f(\vartheta) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2\mu}{\hbar^2} \int U(r)\, d\tau = \frac{2\mu}{\hbar^2} U_0 \frac{a^3}{3}$$

und damit

$$\sigma = 4\pi\, |f(\vartheta)|^2 = \frac{16\pi}{9} \frac{a^6 U_0^2 \mu^2}{\hbar^4}.$$

Mit wachsendem U_0 nimmt der Wirkungsquerschnitt zu und wird für $k_0 a = \pi/2$ unendlich groß. Nun ist $k_0 a = \pi/2$ gerade die Bedingung für das Auftreten des ersten Niveaus im Potentialtopf. Mit wachsender Topftiefe beginnt der Wirkungsquerschnitt abzunehmen, und er verschwindet für $\tan k_0 a = k_0 a$. Nimmt U_0 weiter zu, so schwankt der Wirkungsquerschnitt zwischen 0 und ∞, wobei die unendlichen Werte dem Auftreten neuer Niveaus entsprechen. Die starken Schwankungen des Wirkungsquerschnittes bei der Streuung langsamer Teilchen erklären qualitativ die Tatsache, daß der Wirkungsquerschnitt bei der Streuung langsamer Elektronen durch Atome wesentlich vom geometrischen Querschnitt verschieden sein kann.

Wir merken an, daß die Gl. (2) und (3) modifiziert werden müssen, wenn $k_0 a$ näherungsweise gleich einem ganzzahligen Vielfachen von $\pi/2$ ist, weil $\tan k'a$ dann groß ist und die Entwicklung (1), die auf die Gleichung (2) führte, nicht möglich ist. Wir können wie vorher ka in den eckigen Klammern der Gleichung (1) vernachlässigen ($ka \ll 1$). Es folgt

$$\delta_0 = \operatorname{arc\,tan}\left[\frac{k}{k'} \tan k'a\right].$$

Daraus erhalten wir den Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_0 = \frac{4\pi[1 + O(\varkappa a)]}{\varkappa^2 + k^2},$$

wobei nach Voraussetzung

$$\varkappa = \frac{k'}{\tan k'a} \ll \frac{1}{a}$$

gilt. Diese Formel für die Resonanzstreuung gibt die Beziehung zwischen dem Wirkungsquerschnitt und k für kleine k an, wenn eine geringe Änderung der Tiefe (oder Breite) des Potentialtopfes zum Auftreten oder Verschwinden eines diskreten Niveaus führen kann.

9.2. Man findet

$$\sigma = 4\pi a^2 \left(\frac{\tanh \varkappa a}{\varkappa a} - 1\right)^2 \quad \text{mit} \quad \varkappa = \frac{\sqrt{2\mu U_0}}{\hbar}.$$

Für $U_0 \to \infty$ erhalten wir $\sigma = 4\pi a^2$, d. h., σ ist gleich dem Vierfachen des elastischen Streuquerschnittes einer starren Kugel in der klassischen Mechanik.

9.3. Es ergibt sich

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} = {} & \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l \\ & + \frac{6\cos\vartheta}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin\delta_l \sin\delta_{l+1} \cos(\delta_{l+1} - \delta_l) \\ & + \frac{5}{k^2} \frac{3\cos^2\vartheta - 1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \frac{l(l+1)(2l+1)}{(2l-1)(2l+3)} \sin^2 \delta_l \right. \\ & \left. + \frac{3(l+1)(l+2)}{2l+3} \sin\delta_l \sin\delta_{l+2} \cos(\delta_{l+2} - \delta_l) \right\} + \dots\end{aligned}$$

oder

$$\int_0^\pi d\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l,$$

$$\int_0^\pi \cos\vartheta \, d\sigma = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin\delta_l \sin\delta_{l+1} \cos(\delta_{l+1} - \delta_l),$$

$$\begin{aligned}\int_0^\pi \frac{3\cos^2\vartheta - 1}{2} d\sigma = {} & \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{l(l+1)(2l+1)}{(2l+1)(2l+3)} \sin^2 \delta_l \\ & + \frac{12\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(l+1)(l+2)}{2l+3} \sin\delta_l \sin\delta_{l+2} \cos(\delta_{l+2} - \delta_l).\end{aligned}$$

9.4. Die radialen Wellenfunktionen genügen der Gleichung

$$\chi_l'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu A}{\hbar^2 r^2}\right] \chi_l = 0.$$

Sie müssen ferner die Bedingung $\chi_l(0) = 0$ erfüllen und für $r \to \infty$ endlich sein. Die diesen Bedingungen genügende Lösung besitzt die Form

$$\chi_l = \sqrt{r}\, J_\lambda(kr)$$

mit

$$\lambda = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu A}{\hbar^2}}.$$

Aus den Formeln für das asymptotische Verhalten von $J_\lambda(kr)$ erhalten wir die Phasen

$$\delta_l = -\frac{\pi}{2}\left(\lambda - l - \frac{1}{2}\right) = -\frac{\pi}{2}\left\{\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu A}{\hbar^2}} - \left(l + \frac{1}{2}\right)\right\}.$$

Die Tatsache, daß δ_l nicht von k abhängt, bedeutet, daß für die Streuamplitude gilt

$$f(\vartheta, k) = \frac{1}{k} f_0(\vartheta),$$

wobei $f_0(\vartheta)$ nicht von der Energie der gestreuten Teilchen abhängt. Der Wirkungsquerschnitt

$$d\sigma = \frac{1}{k^2}\,|f_0(\vartheta)|^2\, d\Omega$$

ist der Energie umgekehrt proportional und durch die gesamte Winkelverteilung charakterisiert.

Da die Summe

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2i\,k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l + 1)\, P_l(\cos\vartheta)\,[e^{2i\delta_l} - 1],$$

welche die Streuamplitude $f(\vartheta)$ bestimmt, für $\vartheta \to 0$ divergiert, sind bei der Berechnung von $f(\vartheta)$ für kleine ϑ offensichtlich die großen Werte von l wesentlich. Wir haben für große l

$$-\delta_l \approx -\frac{\pi\mu A}{(2l + 1)\,\hbar^2} \ll 1, \tag{1}$$

woraus folgt

$$f(\vartheta) \approx \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l + 1)\, P_l(\cos\vartheta)\,\delta_l$$

$$\approx -\frac{\pi\mu A}{\hbar^2 k}\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\vartheta) = -\frac{\pi\mu A}{k\hbar^2}\,\frac{1}{2\sin\frac{\vartheta}{2}}.$$

Für

$$\frac{8\mu A}{\hbar^2} \ll 1$$

ist die für δ_l erhaltene Formel (1) für beliebige l gültig, und daher gilt für alle ϑ

$$f(\vartheta) \approx -\frac{\pi\mu A}{k\hbar^2} \frac{1}{2\sin\frac{\vartheta}{2}},$$

$$d\sigma = \frac{\pi^3\mu A^2}{2\hbar^2 E} \cot\frac{\vartheta}{2}\, d\vartheta.$$

9.5. In BORNscher Näherung lautet die Streuamplitude

$$f_{\mathrm{BORN}}(\vartheta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{i\mathfrak{q}\mathfrak{r}}\, U(r)\, d\tau = -\frac{\pi\mu A}{\hbar^2 q}$$

mit

$$\mathfrak{q} = \mathfrak{k}' - \mathfrak{k}, \quad q = 2k\sin\frac{\vartheta}{2}.$$

Folglich gilt

$$d\sigma_{\mathrm{BORN}} = |f(\vartheta)|^2\, d\Omega = \frac{\pi^3\mu A^2}{2\hbar^2 E} \cot\frac{\vartheta}{2}\, d\vartheta.$$

In der klassischen Mechanik ist der Zusammenhang zwischen dem Streuwinkel und dem Stoßparameter ϱ durch

$$\int_{r_0}^{\infty} \frac{\mu v\varrho\, dr}{r^2\sqrt{2\mu(E-U) - \left(\frac{\mu v\varrho}{r}\right)^2}} = \frac{\pi - \vartheta}{2}$$

gegeben, wobei r_0 die Wurzel aus dem Ausdruck unter dem Wurzelzeichen ist. Durch Integration finden wir

$$\varrho^2 = \frac{A}{E}\frac{1}{\vartheta}\frac{(\pi-\vartheta)^2}{2\pi-\vartheta},$$

woraus folgt

$$d\sigma = -2\pi\varrho\frac{d\varrho}{d\vartheta}\, d\vartheta = \frac{2\pi^3 A}{E}\frac{\pi-\vartheta}{\vartheta^2(2\pi-\vartheta)^2}\, d\vartheta.$$

Ist die Bedingung $8\mu A/\hbar^2 \ll 1$ erfüllt, so ist die BORNsche Näherung für alle Winkel anwendbar (vgl. die vorige Aufgabe).

Im entgegengesetzten Grenzfall $8\mu A/\hbar^2 \gg 1$ kann die klassische Formel für Winkel angewandt werden, die der Bedingung

$$\vartheta \gtrsim \frac{\hbar^2}{8\mu A}$$

genügen, während für kleinere Winkel

$$\vartheta \lesssim \frac{\hbar^2}{8\mu A}$$

die mit der BORNschen Näherung gewonnenen Ergebnisse anwendbar sind.

9.6. Die radiale Wellenfunktion genügt der Gleichung

$$\chi'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E + U_0 \, \mathrm{e}^{-r/a})\chi = 0.$$

Wir führen die Bezeichnungen

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad \varkappa^2 = \frac{2\mu U_0}{\hbar^2}$$

ein und wählen $\xi = \exp(-r/2a)$ als unabhängige Variable.

Wir erhalten die Gleichung

$$\chi'' + \frac{1}{\xi}\chi' + 4a^2\left(\frac{k^2}{\xi^2} + \varkappa^2\right)\chi = 0,$$

die durch BESSEL-Funktionen mit imaginärem Index gelöst wird:

$$\chi = J_{\pm 2aki}(2a\varkappa\xi).$$

Aus der Bedingung, daß χ für $r = 0$ ($\xi = 1$) verschwinden muß, finden wir die nichtnormierten Funktionen

$$\chi = J_{-2aki}(2a\varkappa)\, J_{2aki}(2a\varkappa\xi) - J_{2aki}(2a\varkappa)\, J_{-2aki}(2a\varkappa\xi). \tag{1}$$

Für $r \to \infty$ ($\xi \to 0$) besitzt die Funktion χ die asymptotische Form

$$\chi = J_{-2aki}(2a\varkappa)\frac{\mathrm{e}^{2aki\ln a\varkappa}}{\Gamma(2aki+1)}\mathrm{e}^{-ikr}$$

$$- J_{2aki}(2a\varkappa)\frac{\mathrm{e}^{-2aki\ln a\varkappa}}{\Gamma(-2aki+1)}\mathrm{e}^{ikr}.$$

Die bei $\exp(-ikr)$ und $\exp(ikr)$ stehenden Faktoren können als Funktionen einer komplexen Größe k aufgefaßt werden. Bezeichnen wir sie mit $a(k)$ und $b(k)$, so erkennen wir sofort die Gültigkeit der Beziehungen

$$a(-k) = -b(k),$$

$$a^*(k) = -b(k)$$

(bei der Bildung der konjugiert komplexen Größen wird k nicht durch k^* ersetzt).

Wir können für die asymptotische Form von χ schreiben

$$\chi = A(e^{-ikr-i\delta_0} - e^{ikr+\delta_0}) = -2i\,A \sin(kr + \delta_0).$$

Die Streuphase δ_0 folgt aus der Beziehung

$$e^{2i\delta_0} = \frac{J_{2aki}(2a\,\varkappa)}{J_{-2aki}(2a\,\varkappa)}\,\frac{\Gamma(2aki + 1)}{\Gamma(-2aki + 1)}\,e^{-4aki\ln a\varkappa}.$$

Eine rein imaginäre Zahl $k = ik_n$ entspricht einem gebundenen Zustand (in diesem Fall ist die Energie negativ).

Für $k_n > 0$ muß der Faktor von $\exp(-ikr) = \exp(k_n r)$ im ersten Term des asymptotischen Ausdruckes für χ verschwinden. Daher gilt entweder

$$J_{2ak_n}(2a\,\varkappa) = 0$$

oder

$$\frac{1}{\Gamma(2ak_n + 1)} = 0.$$

Aus der zweiten Bedingung folgt

$$2ak_n + 1 = -n \quad (n = 0, 1, 2, \ldots),$$

d. h.

$$E = -\frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2(n+1)^2}{8\mu\,a^2}.$$

Dann werden jedoch die Indizes der Bessel-Funktionen ganzzahlig, so daß die beiden Lösungen wegen $J_n(x) = (-1)^n J_{-n}(x)$ linear abhängig sind und die Wellenfunktion (1) identisch gleich Null ist. Die gewonnenen Energieniveaus haben daher keine reale Bedeutung. Die erste Bedingung liefert das richtige diskrete Spektrum:

$$J_{2ak_n}(2a\,\varkappa) = 0, \quad E_n = -\frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu}. \tag{2}$$

Die Nullstellen des Ausdruckes $\exp[2i\,\delta_0(k)]$ liegen also auf der imaginären Achse und enthalten neben den Werten ik_n, die den diskreten Niveaus (2) entsprechen, überzählige Nullstellen.

9.8. Die radiale Wellenfunktion χ_l/r für das ungestörte Potential genügt der Gleichung

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu\, V(r)}{\hbar^2}\right]\chi_l = 0, \tag{1}$$

wobei

$$\chi_l(0) = 0$$

und

$$\chi_l \to \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right) \quad \text{für} \quad r \to \infty$$

gelten. Wir bezeichnen mit χ_l' die entsprechende Funktion für das Potential $V'(r)$, das sich sehr wenig von $V(r)$ unterscheidet, und es wird

$$\frac{d^2\chi_l'}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu\, V'(r)}{\hbar^2}\right]\chi_l' = 0. \tag{2}$$

Wir multiplizieren (1) mit χ_l' und (2) mit χ_l, subtrahieren die gewonnenen Gleichungen voneinander und integrieren über r von 0 bis ∞:

$$\frac{d\chi_l}{dr}\chi_l' - \chi_l\frac{d\chi_l'}{dr} = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^r (V' - V)\,\chi_l\chi_l'\, dr.$$

Benutzen wir auf der linken Seite der Gleichung die asymptotischen Ausdrücke für χ_l und χ_l' und gehen auf der rechten Seite zur Grenze $r \to \infty$ über, so erhalten wir

$$k \sin(\delta_l' - \delta_l) = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty (V' - V)\,\chi_l\chi_l'\, dr.$$

Diese Relation gilt exakt. Ist die Änderung des Potentials $\varDelta V = V' - V$ so klein, daß man $\chi_l' \approx \chi_l$ setzen kann (dabei gilt natürlich $\delta_l' - \delta_l \ll 1$), so folgt

$$\delta_l' = \delta_l - \frac{2\mu}{\hbar^2 k}\int_0^\infty \varDelta V \chi_l^2\, dr. \tag{3}$$

Ist insbesondere das Streupotential selbst klein (genauer, ist die Störungstheorie anwendbar), so kann man als ungestörtes Problem die freie Bewegung wählen:

$$\chi_l = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\, J_{l+\frac{1}{2}}(kr).$$

Daraus folgt

$$\delta_l = -\frac{\pi\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\, J_{l+\frac{1}{2}}^2(kr)\, r\, dr. \tag{4}$$

9.9. Wir berechnen die Streuphasen mit Hilfe der Formel (4) der letzten Aufgabe:

$$\delta_l = -\frac{\pi\mu a}{\hbar^2}\int_0^\infty J^2_{l+\frac{1}{2}}(kr)\frac{dr}{r^2} = -\frac{\mu\alpha k}{\hbar^2 l(l+1)}.$$

Somit sind die Streuphasen für $l \geqq 1$ klein und für $k \to 0$ proportional zu k (vgl. die Diskussion dieser Frage im § 108 des Lehrbuches „Quantenmechanik" von LANDAU und LIFSCHIZ). Die Bedingung für die Anwendbarkeit dieser Formel besteht darin, daß die Streuphase δ_l klein gegen 1 sein muß. Der Fall $l = 0$ muß gesondert betrachtet werden. Für $r \ll 1/k$ kann man in der Gleichung für χ_0,

$$\chi_0'' + \left[k^2 - \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 r^3}\right]\chi_0 = 0,$$

den Term mit k^2 vernachlässigen und so die Gleichung für BESSEL-Funktionen mit imaginärem Argument gewinnen. Die für $r = 0$ verschwindende Lösung lautet

$$\chi_0 = c\sqrt{r}\,H_1^{(1)}\left(2i\sqrt{\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 r}}\right).$$

Gilt nun $r \gg \mu\alpha/\hbar^2$ und, wie oben, auch $r \ll 1/k$, so kann man für $H_1^{(1)}$ die für kleine Werte des Argumentes geeignete Entwicklung benutzen. Es folgt

$$\chi_0 = c'\left(r - \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\ln\frac{\mu\alpha}{\hbar^2 r}\right). \tag{1}$$

Diese Lösung muß an die Lösung im Außengebiet

$$\chi_0 = \sin(kr + \delta_0) \tag{2}$$

angeschlossen werden, die sich für $kr \ll 1$ (da δ_0 klein ist) auf

$$\chi_0 = kr + \delta_0$$

reduziert.

Um δ_0 mit logarithmischer Genauigkeit zu erhalten, genügt es, in dem logarithmischen Ausdruck in (1) $r \approx 1/k$ zu setzen, so daß folgt

$$\delta_0 = -\frac{2\mu\alpha k}{\hbar^2}\ln\frac{\beta\hbar^2}{\mu\alpha k},$$

wobei β eine Konstante bezeichnet, die näherungsweise gleich 1 ist. Diese Formel zeigt, daß $\delta_0 \ll 1$ gilt. Für kugelsymmetrische Streuung ergibt sich

$$\sigma_0 = \frac{16\pi\mu^2\alpha^2}{\hbar^4}\left(\ln\frac{\hbar^2}{\mu\alpha k}\right)^2,$$

während für $l \gg 1$ folgt

$$\sigma_l = \frac{4\pi\,\mu^2\alpha^2(2l+1)}{\hbar^4 l^2(l+1)^2}.$$

Die Tatsache, daß σ_l für $l \neq 0$ für langsame Teilchen verhältnismäßig groß ist, hängt mit der schwachen Abnahme der potentiellen Energie zusammen. Der totale Streuquerschnitt ist (mit logarithmischer Genauigkeit) gleich σ_0, da die Reihe $\sum_1^\infty \sigma_l$ konvergiert.

9.10. Die der Randbedingung $\chi_l(a) = 0$ genügenden radialen Funktionen lassen sich in folgender Weise durch Bessel-Funktionen ausdrücken:

$$\chi_l = \sqrt{r}\{J_{-l-\frac{1}{2}}(ka)\,J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - J_{l+\frac{1}{2}}(ka)\,J_{-l-\frac{1}{2}}(kr)\}.$$

Aus der Formel für das asymptotische Verhalten der Bessel-Funktionen erhalten wir die Streuphasen:

$$\cot\delta_l = (-1)^{l+1}\frac{J_{-l-\frac{1}{2}}(ka)}{J_{l+\frac{1}{2}}(ka)}.$$

Der totale Wirkungsquerschnitt für elastische Streuung beträgt

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{J^2_{l+\frac{1}{2}}(ka)}{J^2_{l+\frac{1}{2}}(ka) + J^2_{-l-\frac{1}{2}}(ka)} \approx 2\pi\,a^2.$$

9.11.

9.11.1. $$d\sigma = \left(\frac{g^2}{2E}\right)^2 \frac{d\Omega}{\left(\sin^2\frac{\vartheta}{2} + \frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu\,E}\right)^2}; \quad \sigma = \frac{\pi\mu^2 g^4}{\hbar^2\alpha^2(2\mu\,E + \hbar^2\alpha^2)}.$$

9.11.2. $$d\sigma = \frac{\pi\mu^2 U_0}{4\hbar^2\alpha^6}\,\mathrm{e}^{-\frac{4\mu E}{\hbar^2\alpha^2}\sin^2\frac{\vartheta}{2}}\,d\Omega; \quad \sigma = \frac{\pi^2 U_0^2\mu}{4\hbar^2\,\alpha^4 E}\left(1 - \mathrm{e}^{-\frac{4\mu E}{\hbar^2\alpha^2}}\right).$$

9.11.3. $$d\sigma = \frac{16\mu^2\,U_0^2}{\hbar^4}\,\frac{\alpha^2}{(\alpha^2+q^2)^4}\,d\Omega;$$

$$\sigma = \frac{64\pi}{3}\,\frac{\mu^2 U_0}{\hbar^4}\,\frac{16k^4 + 12k^2\alpha^2 + 3\alpha^4}{\alpha^4(\alpha^2+4k^2)^3}.$$

9.12.

9.12.1. Der Atomformfaktor beträgt für Wasserstoff

$$F(q) = \int e^{i\mathfrak{q}\mathfrak{r}} n(\mathfrak{r})\, d\tau = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{i\mathfrak{q}\mathfrak{r} - 2r/a}\, d\tau$$

$$= \frac{1}{\left(1 + \frac{q^2 a^2}{4}\right)^2}$$

($a = \hbar^2/\mu e^2$ ist der BOHRsche Radius).

Damit erhalten wir den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$d\sigma = \frac{4a^2(8 + q^2a^2)^2}{(4 + q^2a^2)^4}\, d\Omega, \quad \left(q = 2k \sin\frac{\vartheta}{2}\right) \tag{1}$$

und den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \frac{\pi a^2}{3} \frac{7k^4a^4 + 18k^2a^2 + 12}{(k^2a^2 + 1)^3}.$$

Die Bedingung für die Anwendbarkeit der BORNschen Näherung lautet in unserem Fall

$$ka \gg 1.$$

Daher reduziert sich der Ausdruck für den totalen Wirkungsquerschnitt auf

$$\sigma = \frac{7\pi}{3k^2}. \tag{2}$$

9.12.2. Mit Hilfe der Variationsrechnung erhält man für die Verteilung der Elektronendichte im Heliumatom

$$n(r) = \frac{2}{\pi b^3} e^{-2r/b}, \quad b = \frac{16}{27} a.$$

Der differentielle und totale Wirkungsquerschnitt der elastischen Streuung an einem Heliumatom besitzen in dieser Näherung dieselbe Form wie im Falle der Streuung am Wasserstoffatom. Wir haben in den Formeln (1) und (2) a durch b zu ersetzen und den Faktor $Z^2 = 4$ einzuführen, so daß folgt

$$\sigma = \frac{28\pi}{3k^2}.$$

9.13. Für $ka \ll 1$ braucht man nur S-Wellen zu berücksichtigen. Setzt man $\psi = \chi/r$, so erhält man die eindimensionale SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{V_0}{\cosh^2 \frac{r}{a}}\right)\chi = 0. \tag{1}$$

Die Funktion χ muß den Randbedingungen

$$\chi(0) = 0, \quad \chi(r)|_{r\to\infty} \approx \sin(kr + \delta_0) \tag{2}$$

genügen, wobei δ_0 die Streuphase der S-Welle ist. Die Streuamplitude beträgt

$$f = \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_0} - 1)$$

und der totale Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = 4\pi|f|^2.$$

Die Lösung der Gleichung (1) wurde in der Aufgabe 1.12. betrachtet. Es wurde gezeigt, daß die Gleichung (1) in r gerade und ungerade Lösungen besitzt. Die erste Randbedingung (2) wird durch die ungerade Lösung

$$\chi(r) = \frac{\sinh \frac{r}{a}}{\cosh^3 \frac{r}{a}} F\left(\frac{-s + ika + 1}{2}, \frac{-s - ika + 1}{2}, \frac{3}{2}; -\sinh^2 \frac{r}{a}\right) \tag{3}$$

erfüllt, wobei

$$s = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - \frac{1}{2}, \quad k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar}}$$

ist und F die hypergeometrische Funktion bedeutet.

Für $r \to \infty$ erhalten wir aus (3)

$$\chi(r) = A\,e^{ikr} + B\,e^{-ikr}, \tag{4}$$

wobei (bis auf einen unwesentlichen reellen Faktor)

$$A = 2^{-ika}\,\Gamma(ika)\,\Gamma\left(\frac{1 - s + ika}{2}\right)\Gamma\left(1 + \frac{s + ika}{2}\right) \tag{5}$$

gilt; für reelle Werte von k ist $B = A^*$.

Durch Vergleich der Formeln (2) und (4) folgt

$$\delta_0 = \frac{1}{2i}\ln\left(-\frac{A}{A^*}\right), \quad f = \frac{i}{2k}\left(\frac{A}{A^*} + 1\right). \tag{6}$$

Für komplexe Werte von k ist die Funktion $\chi(r)$ im allgemeinen nicht beschränkt. Für $\Im m\, k > 0$ existiert nur unter der Bedingung $B = 0$ die unbeschränkte Lösung der Gl. (1). Dazu ist nach (5) notwendig, daß

$$\Gamma\left(\frac{1 - s - ika}{2}\right) \to \infty$$

gilt. Setzen wir $ak = i\varepsilon$ $(\varepsilon > 0)$, so finden wir

$$\varepsilon = s - 2n - 1 \quad \text{oder} \quad E = -\frac{\hbar^2}{2\mu\, a^2}(s - 2n - 1)^2 .$$

Es gibt also diskrete Niveaus mit negativer Energie.

Für das Folgende ist die Tatsache sehr wichtig, daß in der Potentialmulde ein Energieniveau mit der Energie Null auftritt, wenn s gleich einer ungeraden ganzen Zahl ist. Für $s - 1 < 0$, d. h. für $\mu V_0 a^2/\hbar^2 < 1$ gibt es kein einziges Niveau mit negativer Energie. Wir untersuchen diesen Fall genauer. Da $ka \ll 1$ gilt, haben wir näherungsweise

$$\left.\begin{aligned} &\Gamma(ika) \approx \frac{1}{ika}\Gamma(1 + ika) \approx \frac{1 + ika\psi(1)}{ika}\Gamma(1), \\ &\Gamma\left(\frac{1 - s}{2} + \frac{ika}{2}\right) \approx \Gamma\left(\frac{1 - s}{2}\right)\left[1 + \frac{ika}{2}\psi\left(\frac{1 - s}{2}\right)\right], \\ &\Gamma\left(1 + \frac{s}{2} + \frac{ika}{2}\right) \approx \Gamma\left(1 + \frac{s}{2}\right)\left[1 + \frac{ika}{2}\psi\left(1 + \frac{s}{2}\right)\right], \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

wobei $\psi(x) = \dfrac{d}{dx}\ln\Gamma(x)$ die logarithmische Ableitung der Γ-Funktion bedeutet.

Setzen wir (7) in (5) und (6) ein, so erhalten wir

$$\delta_0 = ka\left[-\ln 2 + \psi(1) - \frac{1}{2}\psi\left(\frac{1 - s}{2}\right) - \frac{1}{2}\psi\left(1 + \frac{s}{2}\right)\right]. \tag{8}$$

Für $s < 1$ ist der Ausdruck in den Klammern beschränkt, so daß $\delta_0 \ll 1$ gilt und für den totalen Wirkungsquerschnitt folgt

$$\sigma = 4\pi\, a^2\left[-\ln 2 + \psi(1) - \frac{1}{2}\psi\left(\frac{1 - s}{2}\right) - \frac{1}{2}\psi\left(1 + \frac{s}{2}\right)\right]^2 . \tag{9}$$

Die BORNsche Näherung für $ka \ll 1$ ergibt

$$\sigma = \frac{16\pi\,\mu^2}{\hbar^4}\left|\int_0^\infty V(r)\, r^2\, dr\right|^2 = \frac{16\pi\,\mu^2 V_0^2 a^6}{\hbar^4}\left|\int_0^\infty \frac{x^2\, dx}{\cosh^2 x}\right|^2 .$$

Wegen

$$\int_0^\infty \frac{x^2}{\cosh^2 x}\,dx = \frac{\pi^2}{12}$$

erhalten wir den totalen Wirkungsquerschnitt in der Form

$$\sigma = 4\pi\, a^2 s^2 (s+1)^2 \frac{\pi^4}{144}. \tag{10}$$

Für die Anwendbarkeit der BORNschen Näherung ist es bekanntlich notwendig, daß die Bedingung

$$\frac{2\mu\, a^2 V_0}{\hbar^2} \ll 1$$

erfüllt ist, die in unserer Schreibweise $s \ll 1$ bedeutet.

Entwickeln wir die Funktion ψ in eine Reihe, so erhalten wir

$$\delta_0 \approx \frac{kas}{4}\left\{\psi'\left(\frac{1}{2}\right) - \psi'(1)\right\} = \frac{kas\pi^2}{12}.$$

Die Ausdrücke (9) und (10) stimmen also in diesem Grenzfall erwartungsgemäß miteinander überein. Der Wirkungsquerschnitt ist jedoch bereits für $s = 1/2$ nach dem exakten Ausdruck (9) etwa gleich dem 7fachen des aus der Näherungsformel (10) berechneten Wertes.

Wir setzen nun $s = 1 + \varepsilon$ mit $|\varepsilon| \ll 1$. Für $\varepsilon > 0$ gibt es in der Potentialmulde ein Niveau mit der Energie $E = -\hbar^2\varepsilon^2/2\mu\, a^2$. Für $\varepsilon < 0$ existiert kein reales Niveau; wir sprechen in diesem Fall jedoch von einem virtuellen Niveau, da eine geringe Änderung des äußeren Feldes genügt, damit ein Niveau erscheint.

Wir setzen im betrachteten Fall

$$\Gamma\left(\frac{1-s+ika}{2}\right) \approx \Gamma\left(\frac{-s+ika}{2}\right) \approx \frac{2}{-s+ika},$$

$$\Gamma\left(1+\frac{s}{2}+\frac{ika}{2}\right) \approx \Gamma\left(\frac{3}{2}\right), \quad \Gamma(ika) \approx \frac{1}{ika},$$

so daß

$$A \approx \frac{-s+ika}{ika}$$

wird.

Setzen wir dies in (6) ein, so erhalten wir

$$f = -\frac{a}{s + ika},$$

so daß sich für den Wirkungsquerschnitt die bekannte WIGNERsche Formel

$$\sigma = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}\,\frac{1}{E + |E_0|} \tag{11}$$

mit

$$E_0 = \frac{\hbar^2 \varepsilon^2}{2\mu a^2}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

ergibt. Für $E \gg E_0$ gilt

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2} \gg 4\pi a^2.$$

Für $E \ll E_0$ wird der Wirkungsquerschnitt von der Energie unabhängig und strebt gegen den Wert

$$\sigma_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu E_0}.$$

Es sei nun s größer als 1 und nicht näherungsweise gleich einer ungeraden Zahl. Dann gelten wie oben die Entwicklungen (7) und die aus ihnen folgenden Formeln (8) und (9).

Für $s = 1 + 2n + \varepsilon$ mit $|\varepsilon| \ll 1$ kann man unter Benutzung der Rekursionsformeln für die Γ-Funktion leicht zeigen, daß der Wirkungsquerschnitt durch (11) gegeben ist.

9.14. Das Problem wird ähnlich wie die vorige Aufgabe gelöst. Der wesentliche Unterschied zur vorigen Aufgabe besteht darin, daß im Falle eines abstoßenden Feldes keine diskreten Energieniveaus existieren.

Die asymptotische Form der Wellenfunktion ist

$$\chi(r) = A\,e^{ikr} + B\,e^{-ikr},$$

wobei A durch den Ausdruck (5) der vorigen Aufgabe gegeben und

$$B = 2^{ika}\,\Gamma(-ika)\left[\Gamma\left(\frac{1 - s - ika}{2}\right)\Gamma\left(1 + \frac{s - ika}{2}\right)\right]^{-1}$$

ist mit

$$s = \frac{1}{2}\sqrt{1 - \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}} - \frac{1}{2}.$$

Für beliebige Werte von $V_0 > 0$ und a bleibt der Parameter s entweder kleiner als 1 oder wird komplex. In beiden Fällen sind die Bedingungen für die Anwendbarkeit der näherungsweise gültigen Formeln (7) erfüllt. Daher bleiben die Ausdrücke (8) und (9) richtig.

9.15. Die Wellenfunktion eines aus zwei identischen Teilchen bestehenden Systems besitzt die Form eines Produktes aus Orts- und Spinfunktion. Unabhängig davon, ob der Spin der Teilchen ganz- oder halbzahlig ist, entspricht ein gerader Gesamtspin einer symmetrischen und ein ungerader Gesamtspin einer antisymmetrischen Ortswellenfunktion.

Führt man die Koordinaten des Massenmittelpunktsystems ein und separiert die Schwerpunktsvariablen ab, so erhält man die Ortswellenfunktion in der Form

$$\Psi(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2) = \varphi(\mathfrak{R})\, \psi(\vec{\varrho}),$$

wobei

$$\mathfrak{R} = \frac{\mathfrak{r}_1 + \mathfrak{r}_2}{2}, \quad \vec{\varrho} = \mathfrak{r}_1 - \mathfrak{r}_2$$

sind. Bei einer Vertauschung von $\mathfrak{r}_1$ und $\mathfrak{r}_2$ ändert sich die Funktion $\varphi(\mathfrak{R})$, welche die Bewegung des Schwerpunktes beschreibt, natürlich nicht. Daher muß die Wellenfunktion der Relativbewegung der beiden Teilchen bei geradem Gesamtspin S spiegelsymmetrisch sein:

$$\psi(\vec{\varrho}) = \psi(-\vec{\varrho}),$$

und bei ungeradem Gesamtspin S antisymmetrisch:

$$\psi(\vec{\varrho}) = -\psi(-\vec{\varrho}).$$

Man kann die ungestörte Wellenfunktion bei geradem S in der Form

$$\psi(\vec{\varrho}) = e^{i\mathfrak{k}_0\vec{\varrho}} + e^{-i\mathfrak{k}_0\vec{\varrho}} \tag{1}$$

und bei ungeradem S in der Form

$$\psi(\vec{\varrho}) = e^{i\mathfrak{k}_0\vec{\varrho}} - e^{-i\mathfrak{k}_0\vec{\varrho}} \tag{2}$$

schreiben. Infolge der Wechselwirkung der Teilchen entsteht eine Streuwelle

$$\frac{F(\vartheta)}{\varrho}\, e^{ik\varrho},$$

wobei ϑ der Winkel zwischen $\mathfrak{k}_0$ und der Richtung ist, in der sich die Teilchen im Massenmittelpunktsystem bewegen. Die Streuamplitude ist gleich der Streuamplitude eines Teilchens mit der reduzierten Masse der beiden Teilchen im

Feld $U(r)$. In der Tat genügt $\psi(\vec{\varrho})$ der Gleichung

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\Delta_\varrho + k^2) - U(\varrho)\right\}\psi(\vec{\varrho}) = 0.$$

Entspricht die Streuwelle $\frac{f(\vartheta)}{r}\,e^{ik\varrho}$ der einfallenden Welle $e^{i\vec{k}_0\vec{\varrho}}$, so erhält man für die einfallende Welle (1)

$$F_0(\vartheta) = f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta) \quad \text{(gerader Spin)}$$

und für (2)

$$F_1(\vartheta) = f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta) \quad \text{(ungerader Spin).}$$

Das Verhältnis der Wahrscheinlichkeit für die Streuung eines Teilchens in den Raumwinkel $d\Omega$ (das andere Teilchen bewegt sich dabei in entgegengesetzter Richtung) zur einfallenden Stromdichte beträgt

$$d\sigma_0 = |f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta)|^2\, d\Omega,$$

$$d\sigma_1 = |f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta)|^2\, d\Omega.$$

Man erhält die Amplitude $f(\vartheta)$ aus den Streuphasen δ_l mit Hilfe der Beziehung

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,P_l(\cos\vartheta)\,[e^{2i\delta_l} - 1].$$

Wegen

$$P_l[\cos(\pi - \vartheta)] = P_l(-\cos\vartheta) = (-1)^l\,P_l(\cos\vartheta)$$

ergibt sich

$$F_0(\vartheta) = \frac{1}{ik}\sum_{l\ \text{gerade}}(2l+1)\,P_l(\cos\vartheta)\,[e^{2i\delta_l} - 1],$$

$$F_1(\vartheta) = \frac{1}{ik}\sum_{l\ \text{ungerade}}(2l+1)\,P_l(\cos\vartheta)\,[e^{2i\delta_l} - 1].$$

Für langsame Teilchen rührt der Hauptbeitrag zur Streuung von kleinen l her. Im Falle eines geraden Gesamtspins ist der Wirkungsquerschnitt (wie im Falle verschiedenartiger Teilchen) kugelsymmetrisch und für $k \to 0$ ungleich Null.

Bei ungeradem Gesamtspin wird der Wirkungsquerschnitt durch den Term mit $l = 1$ bestimmt. Da $\delta_l \approx k^{2l+1}$ für kleine Wellenzahlen k gilt, geht der Wirkungsquerschnitt mit $E \to 0$ wie E^2 gegen Null und zeigt eine Winkelabhängigkeit $\sim \cos^2\vartheta$.

9.16. Im Falle des COULOMB-Feldes ist die Streuamplitude (in COULOMB-Einheiten)

$$f(\vartheta) = -\frac{1}{2k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} e^{-\frac{2i}{k} \ln \sin \frac{\vartheta}{2}} \frac{\Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right)}{\Gamma\left(1 - \frac{i}{k}\right)}.$$

Aus den Ergebnissen der vorigen Aufgabe ergibt sich der differentielle Streuquerschnitt bei geradem Spin zu

$$d\sigma_0 = |f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta)|^2 \, d\Omega$$

$$= \frac{1}{4k^4} \left\{ \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{2 \cos\left(\frac{2}{k} \ln \tan \frac{\vartheta}{2}\right)}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \frac{\vartheta}{2}} \right\} d\Omega.$$

Diese Formel gibt den Streuquerschnitt für α-Teilchen an, deren Spin gleich Null ist.

Im Falle von zwei Elektronen ist ein Zustand mit dem Gesamtspin 1 möglich. Der differentielle Wirkungsquerschnitt beträgt dann

$$d\sigma_1 = |f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta)|^2 \, d\Omega$$

$$= \frac{1}{4k^4} \left\{ \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\vartheta}{2}} - \frac{2 \cos\left(\frac{2}{k} \ln \tan \frac{\vartheta}{2}\right)}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \frac{\vartheta}{2}} \right\} d\Omega.$$

Sind die gestreuten Elektronen nicht polarisiert, so kann die z-Komponente des Gesamtspins die drei Werte $M_S = 0$, $M_S = 1$ und $M_S = -1$ und der Gesamtspin die Werte $S = 0$ und $S = 1$ annehmen. Die Wahrscheinlichkeiten für die oben angegebenen Werte der Komponenten sind $W_{-1} = \frac{1}{4}$, $W_0 = \frac{1}{2}$ und $W_{+1} = \frac{1}{4}$. Die Werte $M_S = +1$ oder $M_S = -1$ entsprechen natürlich dem Gesamtspin $S = 1$. Da die verschiedenen Werte der z-Komponente für $S = 1$ gleichwahrscheinlich sind, ist die Wahrscheinlichkeit für $M_S = 0$ beim Gesamtspin 1 wie im Falle $M_S = \pm 1$ gleich $\frac{1}{4}$. Daher ist die Wahrscheinlichkeit für den Gesamtspin $S = 0$ gleich $W_0 - \frac{1}{4} = \frac{1}{4}$, während die Wahrscheinlichkeit für $S = 1$ gleich $\frac{3}{4}$ ist. Für ein unpolarisiertes Elektronen-

bündel gilt daher

$$d\sigma = \frac{1}{4}\,d\sigma_0 + \frac{3}{4}\,d\sigma_1$$

$$= \frac{1}{4k^4}\left\{\frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4\frac{\vartheta}{2}} - \frac{\cos\left(\frac{2}{k}\ln\tan\frac{\vartheta}{2}\right)}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}\cos^2\frac{\vartheta}{2}}\right\}d\Omega.$$

Der letzte Interferenzterm in den geschweiften Klammern ist für die Streuung identischer Teilchen charakteristisch. Für $\hbar \to 0$ muß der obige Ausdruck für $d\sigma$ in die klassische RUTHERFORD-Formel übergehen, die im Massenmittelpunktsystem lautet

$$d\sigma = \frac{1}{4k^4}\left\{\frac{1}{\sin^4\frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4\frac{\vartheta}{2}}\right\}d\Omega.$$

Der Übergang zu dieser Formel erfolgt nicht in der üblichen Weise. Ist die Bedingung $e^2/\hbar v \gg 1$ erfüllt, d. h., können wir die klassische Theorie anwenden, so wird der Interferenzterm, der in konventionellen Einheiten die Form

$$\frac{\cos\left(\frac{2e^2}{\hbar v}\ln\tan\frac{\vartheta}{2}\right)}{\sin^2\frac{\vartheta}{2}\cos^2\frac{\vartheta}{2}}$$

besitzt, stark oszillieren. Der quantenmechanische differentielle Wirkungsquerschnitt für einen festen Wert von ϑ unterscheidet sich also selbst für große Werte von $e^2/\hbar v$ wesentlich vom klassischen Wirkungsquerschnitt. Bildet man jedoch das Mittel über einen kleinen Winkelbereich $\Delta\vartheta \approx \hbar v/e^2$, so verschwindet der Interferenzterm, und die quantentheoretische Formel geht in die klassische über.

9.18. Die radiale Wellenfunktion χ/r eines langsamen Neutrons im Kern besitzt die Form

$$\chi = A\sin\varkappa r, \quad \varkappa = \sqrt{2MV_0}/\hbar$$

(es gilt $E \ll V_0$, da die Neutronen langsam sind).

Außerhalb des Kerns gilt

$$\chi = \sin(kr + \delta_0), \quad k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar}.$$

Verbindet man diese Lösungen auf der Kernoberfläche, so erhält man die Beziehung

$$\frac{\delta_0}{k} \approx \frac{\tan \varkappa R}{\varkappa R} - 1,$$

aus der sich die Streulänge ergibt:

$$a = -\left(\frac{\delta_0}{k}\right)_{k \to 0} = \frac{\varkappa R - \tan \varkappa R}{\varkappa R}.$$

Das Vorzeichen der Streulänge ist also für $\varkappa R < \tan \varkappa R$ negativ. Für $\varkappa R \gg 1$ (diese Bedingung gilt für nicht sehr leichte Kerne) ist das Gebiet, in dem $a < 0$ gilt, ein kleiner Bruchteil des Gebietes, in dem $\varkappa R$ variiert, und die Wahrscheinlichkeit für negatives a beträgt

$$W \approx \frac{\hbar}{\pi R \sqrt{2M V_0}} \sim \frac{1}{4A^{1/3}}.$$

9.19. Man erhält

$$a^2 = \frac{3}{4} a_1^2 + \frac{1}{4} a_0^2 + \frac{1}{4} (a_1^2 - a_0^2)(\vec{\sigma}_n \vec{\sigma}_p).$$

Der Mittelwert des Operators $(\vec{\sigma}_n \vec{\sigma}_p)$ in dem durch die Spinfunktion

$$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos\beta \\ e^{+i\alpha} \sin\beta \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p$$

beschriebenen Zustand ist

$$\overline{(\vec{\sigma}_n \vec{\sigma}_p)} = \cos^2\beta - \sin^2\beta.$$

Daher erhält man den Streuquerschnitt

$$\sigma = \pi\{3a_1^2 + a_0^2 - (a_1^2 - a_0^2)\cos 2\beta\}$$

oder

$$\sigma = \left\{\frac{3}{4}\sigma^{\text{tripl}} + \frac{1}{4}\sigma^{\text{sing}} - \frac{\cos 2\beta}{4}(\sigma^{\text{tripl}} - \sigma^{\text{sing}})\right\}.$$

Wegen

$$\overline{\cos 2\beta} = 0$$

findet man für ein unpolarisiertes Neutronenbündel den Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \frac{3}{4}\sigma^{\text{tripl}} + \frac{1}{4}\sigma^{\text{sing}}.$$

9.20. Vor dem Einsetzen der Wechselwirkung wird der Spinzustand von Neutron und Proton durch die Funktion

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p$$

beschrieben. Wir entwickeln diese Funktion nach den Spinfunktionen des Singulett- und Triplettzustandes:

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right\} + \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right\}\right].$$

Die Streuwelle besitzt die Form

$$\frac{e^{ikr}}{r}\frac{1}{\sqrt{2}}\left[a_1\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right\} + a_0\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right\}\right]$$

oder

$$\frac{e^{ikr}}{r}\left\{\frac{a_1 + a_0}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p + \frac{a_1 - a_0}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right\}.$$

Daraus ergibt sich die Wahrscheinlichkeit für das Umklappen des Spins zu

$$\frac{1}{2}\frac{(a_1 - a_0)^2}{a_1^2 + a_0^2}.$$

9.21. Wir führen den Operator des Gesamtspins der beiden Protonen ein:

$$\frac{1}{2}(\vec{\sigma}_{p1} + \vec{\sigma}_{p2}) = \mathfrak{S}.$$

Wie man leicht zeigt, gilt

$$(\vec{\sigma}_n\mathfrak{S})^2 = \mathfrak{S}^2 - (\vec{\sigma}_n\mathfrak{S}).$$

Mit Hilfe der letzten Beziehung erhalten wir

$$a^2 = \frac{1}{4}\{(a_0 + 3a_1)^2 + (5a_1^2 - 2a_1a_0 - 3a_0^2)(\vec{\sigma}_n\mathfrak{S}) + (a_1 - a_0)^2\mathfrak{S}^2\}.$$

Im Falle der Streuung an Para-Wasserstoff ergibt sich der Wirkungsquerschnitt

$$\sigma^{\text{para}} = \pi(a_0 + 3a_1)^2.$$

Es ist zu erwarten, daß der Wirkungsquerschnitt nicht von der Polarisation der Neutronen abhängt, da es keine physikalisch ausgezeichnete Richtung im Raum gibt.

Der Wirkungsquerschnitt für die Streuung an Ortho-Wasserstoff ist

$$\sigma^{\text{ortho}} = \pi\{(a_0 + 3a_1)^2 + (5a_1^2 - 2a_1a_0 - 3a_0^2)\cos 2\beta + 2(a_1 - a_0)^2\},$$

wobei 2β der Winkel zwischen den Richtungen des Gesamtspins der beiden Protonen und dem Spin des Neutrons ist.

Ist das Neutronenbündel nicht polarisiert, so ist der Mittelwert von $\cos 2\beta$ für die gemischte Gesamtheit gleich Null, und σ^{ortho} besitzt die Form

$$\sigma^{\text{ortho}} = \pi\{(a_0 + 3a_1)^2 + 2(a_1 - a_0)^2\}.$$

Für das Verhältnis der Wirkungsquerschnitte folgt

$$\frac{\sigma^{\text{ortho}}}{\sigma^{\text{para}}} = 1 + 2\left(\frac{a_1 - a_0}{a_0 + 3a_1}\right)^2.$$

9.22. Die radialen Funktionen, die der Randbedingung $\chi_l(a) = 0$ genügen, lassen sich in folgender Weise durch BESSEL-Funktionen ausdrücken:

$$\chi_l = \sqrt{r}\,\{J_{-l-\frac{1}{2}}(ka)\,J_{l+\frac{1}{2}}(kr) - J_{l+\frac{1}{2}}(ka)\,J_{-l-\frac{1}{2}}(kr)\}.$$

Aus den Formeln für das asymptotische Verhalten der BESSEL-Funktionen finden wir die Streuphasen:

$$\cot\delta_l = (-1)^{l+1}\frac{J_{-l-\frac{1}{2}}(ka)}{J_{l+\frac{1}{2}}(ka)}.$$

Daraus ergibt sich der totale Wirkungsquerschnitt der elastischen Streuung:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{J_{l+\frac{1}{2}}^2(ka)}{J_{l+\frac{1}{2}}^2(ka) + J_{-l-\frac{1}{2}}^2(ka)} \approx 2\pi a^2.$$

9.23. Da die Streulänge vom Gesamtdrehimpuls abhängt, wird die Streuung der Neutronen durch die beiden Streulängen $a_{I-1/2}$ und $a_{I+1/2}$ charakterisiert.

Die Wahrscheinlichkeit, den Gesamtdrehimpuls $I - {}^1/_2$ bzw. $I + {}^1/_2$ vorzufinden, ist gleich $I/(2I+1)$ bzw. $(I+1)/(2I+1)$. Damit erhalten wir den effektiven Querschnitt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{I}{2I+1}|a_{I-1/2}|^2 + \frac{I+1}{2I+1}|a_{I+1/2}|^2.$$

9.24. In großem Abstand vom Target (das Target besteht aus skalaren Teilchen) ist die Wellenfunktion der einfallenden Teilchen gegeben durch

$$e^{ikz}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \approx \frac{1}{2k\,r}\sum_{l=0}^{\infty} i^{l+1}(2l+1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} P_l(\cos\vartheta) \times \left\{e^{-i[kr-(\pi l/2)]} - e^{i[kr-(\pi l/2)]}\right\}. \tag{1}$$

Wir entwickeln die Funktion $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} P_l(\cos\vartheta)$ nach Eigenfunktionen des Operators $\mathfrak{J}^2$ und erhalten

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} P_l(\cos\vartheta) = \frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} Y_{l0}(\vartheta) = \frac{2\sqrt{\pi}}{2l+1}\left\{\sqrt{l+1}\,\Psi_l^+ + \sqrt{l}\,\Psi_l^-\right\}. \tag{2}$$

Dabei bezeichnen Ψ_l^+ und Ψ_l^- die PAULI-Funktionen:

$$\Psi_l^+ = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+1}\;Y_{l0}\\ \sqrt{l}\,Y_{l1}\end{pmatrix} \qquad \left(j = l + \frac{1}{2},\, l,\, m_j = \frac{1}{2}\right),$$

$$\Psi_l^- = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l}\,Y_{l0}\\ -\sqrt{l+1}\;Y_{l1}\end{pmatrix} \qquad \left(j = l - \frac{1}{2},\, l,\, m_j = \frac{1}{2}\right)$$

(vgl. Aufgabe 4.21.)

Setzen wir (2) in (1) ein, so ergibt sich

$$e^{ikz}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \approx \frac{\sqrt{\pi}}{kr}\sum_{l=0}^{\infty} i^{l+1}\left\{\sqrt{l+1}\,\Psi_l^+ + \sqrt{l}\,\Psi_l^-\right\} \times \left\{e^{-i[kr-(\pi l/2)]} - e^{i[kr-(\pi l/2)]}\right\}. \tag{3}$$

Infolge der Wechselwirkung ändert sich nur die auslaufende Welle e^{ikr}/r. Da $\mathfrak{j}^2$, $\mathfrak{l}^2$ und j_z für jeden Typ der Wechselwirkung zwischen diesen Teilchen Konstanten der Bewegung sind (vgl. Aufgabe 4.48.), wird die Änderung der auslaufenden Welle im allgemeinen für Zustände mit verschiedenen Quantenzahlen j und l unterschiedlich sein. Für die auslaufende Welle erhalten wir den Ausdruck

$$\Psi_s \approx \frac{e^{ikr}}{r}\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{l=0}^{\infty}\left\{\sqrt{l+1}(\eta_l^+ - 1)\,\Psi_l^+ + \sqrt{l}(\eta_l^- - 1)\,\Psi_l^-\right\},$$

$$\eta_l^+ = \eta(j = l + \tfrac{1}{2}, l), \quad \eta_l^- = \eta(j = l - \tfrac{1}{2}, l)$$

oder

$$\Psi_s \approx \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2l+1}}$$

$$\times \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} Y_{l0}[(l+1)(\eta_l^+ - 1) + l(\eta_l^- - 1)] \right.$$

$$\left. + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} Y_{l1}(\eta_l^+ - \eta_l^-) \right\}.$$

Mithin kann der Spin des Teilchens für $\eta_l^+ \neq \eta_l^-$ umklappen. Wir wollen nun den Streuquerschnitt durch η_l^+ und η_l^- ausdrücken. Der differentielle Streuquerschnitt beträgt bei Änderung der Polarisation

$$d\sigma_1 = \frac{\pi}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{\frac{l(l+1)}{2l+1}} (\eta_l^+ - \eta_l^-) Y_{l1} \right|^2 d\Omega$$

und ohne Änderung der Polarisation

$$d\sigma_2 = \frac{\pi}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} Y_{l0} \{(l+1)(\eta_l^+ - 1) + l(\eta_l^- - 1)\} \right|^2 d\Omega.$$

Ist die Relativgeschwindigkeit der Teilchen nicht zu groß, so braucht man nur die S- und P-Welle zu berücksichtigen:

$$|\eta_l^+ - 1| \ll 1, \quad |\eta_l^- - 1| \ll 1 \quad \text{für} \quad l > 1.$$

In diesem Fall gilt

$$d\sigma_1 \approx \frac{1}{4k^2} (\eta_1^+ - \eta_1^-) \sin^2 \vartheta \, d\Omega,$$

$$d\sigma_2 \approx \frac{1}{4k^2} |\cos \vartheta (2\eta_1^+ + \eta_1^- - 1) + \eta_0^+ - 1|^2 \, d\Omega.$$

Aus dem Ausdruck für $d\sigma_1$ sieht man, daß die Teilchen, die ihre Spinrichtungen ändern, hauptsächlich in Richtungen senkrecht zur z-Achse gestreut werden.

9.26. Wegen $R \gg \lambda$ können wir eine quasiklassische Überlegung durchführen. Da auf den Kern alle Teilchen mit $l \leqq R/\lambda$ auftreffen, gilt

$$\eta_l = 0 \quad \text{für} \quad l < R/\lambda,$$

$$\eta_l = 1 \quad \text{für} \quad l > R/\lambda.$$

Setzen wir diese Werte von η_l in die Formeln für die totalen Wirkungsquerschnitte

$$\sigma_a = \pi\lambda^2 \sum (2l + 1)(1 - |\eta_l|^2), \qquad \sigma_s = \pi\lambda^2 \sum (2l + 1)|1 - \eta_l|^2$$

ein, so erhalten wir

$$\sigma_a = \sigma_s = \pi\lambda \sum_{l=0}^{R/\lambda} (2l + 1) \approx \pi R^2 .$$

Der totale Wirkungsquerschnitt $\sigma = \sigma_a + \sigma_s$ ist also doppelt so groß wie der geometrische Querschnitt des Kerns.

9.27. Die Verteilung ist in allen drei Fällen isotrop.

9.28.[1]) Die Eigenfunktionen des Operators I_z des Meson-Nukleon-Systems lassen sich darstellen durch alle möglichen Produkte der Funktionen φ und ψ. Dabei entspricht φ den verschiedenen Ladungszuständen des Mesons $(\varphi_+, \varphi_0, \varphi_-)$ und ψ denen des Nukleons (ψ_p, ψ_n). Es gibt insgesamt sechs solcher Funktionen:

$(p^+) = \varphi_+\psi_p$ $I_z = {}^3/_2$	$(p^0) = \varphi_0\psi_p$ $I_z = {}^1/_2$	$(p^-) = \varphi_-\psi_p$ $I_z = -{}^1/_2$
$(n^+) = \varphi_+\psi_n$ $I_z = {}^1/_2$	$(n^0) = \varphi_0\psi_n$ $I_z = -{}^1/_2$	$(n^-) = \varphi_-\psi_n$ $I_z = -{}^3/_2$

Dabei bezeichnet (p^+) die Funktion eines aus π^+-Meson und Proton bestehenden Systems, (n^+) die Funktion eines aus π^+-Meson und Neutron bestehenden Systems usw. Im allgemeinen sind diese Funktionen keine Eigenfunktionen des Operators des Gesamtisospinquadrates $\mathfrak{I}^2$ des Systems.

Die Eigenfunktionen von $\mathfrak{I}^2$, die zu einem vorgegebenen Eigenwert von I_z gehören, sind Linearkombinationen der oben angegebenen Funktionen mit Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten für $m' = \pm{}^1/_2$ besitzen die Form (vgl. Aufgabe 4.21.)

	$m' = {}^1/_2$	$m' = -{}^1/_2$
$I = j + {}^1/_2$	$\sqrt{\dfrac{j + M + {}^1/_2}{2j + 1}}$	$\sqrt{\dfrac{j - M + {}^1/_2}{2j + 1}}$
$I = j - {}^1/_2$	$-\sqrt{\dfrac{j - M + {}^1/_2}{2j + 1}}$	$\sqrt{\dfrac{j + M + {}^1/_2}{2j + 1}}$

In unserem Fall gilt $M = I_z$, $j = 1$, $m' = \tau_z$.

---

[1]) In 9.28.—9.31. werden für die Operatoren I_z, τ_z und ihre Eigenwerte die gleichen Symbole verwendet.

Mit Hilfe der Tabelle erhalten wir die Eigenfunktionen $\Phi^I_{I_z}$ der Operatoren $\mathfrak{I}^2$ und I_z:

$$\Phi^{3/2}_{3/2} = (p^+),$$

$$\Phi^{3/2}_{1/2} = \sqrt{\frac{2}{3}}(p^0) + \sqrt{\frac{1}{3}}(n^+),$$

$$\Phi^{3/2}_{-1/2} = \sqrt{\frac{1}{3}}(p^-) + \sqrt{\frac{2}{3}}(n^0),$$

$$\Phi^{3/2}_{-3/2} = (n^-),$$

$$\Phi^{1/2}_{1/2} = -\sqrt{\frac{1}{3}}(p^0) + \sqrt{\frac{2}{3}}(n^+),$$

$$\Phi^{1/2}_{-1/2} = -\sqrt{\frac{2}{3}}(p^-) + \sqrt{\frac{1}{3}}(n^0).$$

Wir können nun die Eigenfunktionen des Meson-Nukleon-Systems durch die Eigenfunktionen von $\mathfrak{I}^2$ und I_z ausdrücken:

$$(p^+) = \Phi^{3/2}_{3/2}, \quad (n^+) = \sqrt{\frac{1}{3}}\,\Phi^{3/2}_{1/2} + \sqrt{\frac{2}{3}}\,\Phi^{1/2}_{1/2},$$

$$(p^0) = \sqrt{\frac{2}{3}}\,\Phi^{3/2}_{1/2} - \sqrt{\frac{1}{3}}\,\Phi^{1/2}_{1/2}, \quad (n^0) = \sqrt{\frac{2}{3}}\,\Phi^{3/2}_{-1/2} + \sqrt{\frac{1}{3}}\,\Phi^{1/2}_{-1/2},$$

$$(p^-) = \sqrt{\frac{1}{3}}\,\Phi^{3/2}_{-1/2} - \sqrt{\frac{2}{3}}\,\Phi^{1/2}_{-1/2}, \quad (n^-) = \Phi^{3/2}_{-3/2}.$$

9.29.[1]) Die Entwicklung der einfallenden Welle lautet

$$\psi = e^{ikz}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\delta(\pi - \pi_i)\,\delta(n - \tau_z)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)\,P_l(\cos\vartheta)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\delta(\pi - \pi_i)\,\delta(n - \tau_z)\,\frac{\sin(kr - \pi l/2)}{kr}$$

$$= 2\sqrt{\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_I C^{I\tau_z}_{I_z}\Phi^I_{I_z} i^l\sqrt{2l+1}\;Y_{l0}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\frac{\sin(kr - \pi l/2)}{kr}, \qquad (1)$$

[1]) Vgl. Fußnote zu S. 288.

wobei $C_{I_z}^{I\tau_z}$ die in der Tabelle angegebenen CLEBSCH-GORDAN-Koeffizienten sind:

	$\tau_z = {}^1/_2$	$\tau_z = -{}^1/_2$
$C_{I_z}^{3/2}$	$\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{I_z}{3}}$	$\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{I_z}{3}}$
$C_{I_z}^{1/2}$	$-\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{I_z}{3}}$	$\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{I_z}{3}}$

Dabei benutzten wir die Beziehung (vgl. Aufgabe 9.28.)

$$\delta(\pi - \pi_i)\,\delta(n - \tau_z) = \sum_I C_{I_z}^{I\tau_z} \Phi_{I_z}^I .$$

Wir führen die PAULI-Funktionen für $m_j = {}^1/_2$ (vgl. Aufgabe 9.24.)

$$Y_l^+ = \begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l+1}{2l+1}}\, Y_{l0} \\ \sqrt{\dfrac{l}{2l+1}}\, Y_{l1} \end{pmatrix}, \quad Y_l^- = \begin{pmatrix} \sqrt{\dfrac{l}{2l+1}}\, Y_{l0} \\ -\sqrt{\dfrac{l+1}{2l+1}}\, Y_{l1} \end{pmatrix}$$

ein, nach denen wir die Funktion $Y_{l0}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ entwickeln:

$$Y_{l0}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} (\sqrt{l+1}\, Y_l^+ + \sqrt{l}\, Y_l^-). \tag{2}$$

Setzen wir (2) in (1) ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{2\sqrt{\pi}}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_I i^l (\sqrt{l+1}\, Y_l^+ + \sqrt{l}\, Y_l^-) \sin(kr - \pi l/2)\, C_{I_z}^{I\tau_z} \Phi_{I_z}^I \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_I (\sqrt{l+1}\, Y_l^+ + \sqrt{l}\, Y_l^-)\, C_{I_z}^{I\tau_z} \Phi_{I_z}^I [e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}] \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_I C_{I_z}^{I\tau_z} \Phi_{I_z}^I (\sqrt{l+1}\, Y_l^+ + \sqrt{l}\, Y_l^-) \frac{e^{ikr}}{r} \\ &\quad - \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_I C_{I_z}^{I\tau_z} \Phi_{I_z}^I (\sqrt{l+1}\, Y_l^+ + \sqrt{l}\, Y_l^-) (-1)^l \frac{e^{-ikr}}{r}. \end{aligned} \tag{3}$$

9.30.[1]) Wir benutzen die Entwicklung der einfallenden Welle nach den Eigenfunktionen der Operatoren, die Bewegungskonstanten sind [siehe die Gl. (3) der vorigen Aufgabe].

---

[1]) Vgl. Fußnote zu S. 288.

Jeder Term dieser Summe, der vorgegebenen Werten von l, J und I entspricht, wird unabhängig von den anderen gestreut werden.

Infolgedessen wird sich die Zahl der Teilchen mit vorgegebenen Werten von l, J und I bei der elastischen Streuung nicht ändern. Daher reduziert sich der Einfluß des Streuzentrums auf die Multiplikation mit einem Phasenfaktor $e^{2i\delta_{l\pm}^{I}}$. Dabei ist $\delta_{l\pm}^{I} = \delta_{l,J=l\pm 1/2}^{I}$ entsprechend der Annahme über die Isospininvarianz eine Funktion von l, J und I und nicht von I_z.

Das Streuzentrum beeinflußt nicht die einfallenden, sondern nur die auslaufenden Wellen. Daher kann man die Wellenfunktion des Systems bei Berücksichtigung der Streuung schreiben

$$\psi = \frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{I}\sum_{l=0}^{\infty} C_{I_z}^{I\tau_z}\Phi_{I_z}^{I}\left(\sqrt{l+1}\,Y_l^{+}\,e^{2i\delta_{l+}^{I}} + \sqrt{l}\,Y_l^{-}\,e^{2i\delta_{l-}^{I}}\right)\frac{e^{ikr}}{r}$$
$$-\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{I}\sum_{l=0}^{\infty} C_{I_z}^{I\tau_z}\Phi_{I_z}^{I}(\sqrt{l+1}\,Y_l^{+} + \sqrt{l}\,Y_l^{-})\frac{e^{-ikr}}{r}. \quad (1)$$

Für große Abstände vom Streuzentrum kann man diese Gleichung in der Form

$$\psi = \psi_{\text{ein}} + f\frac{e^{ikr}}{r}$$

darstellen, wobei f die Streuamplitude ist. Subtrahieren wir von (1) den Ausdruck für ψ_{ein} [siehe Gl. (3) der Aufgabe 9.29.], so erhalten wir

$$f = \frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{I}\sum_{l=0}^{\infty} C_{I_z}^{I\tau_z}\Phi_{I_z}^{I}\left\{\sqrt{l+1}\,Y_l^{+}\left(e^{2i\delta_{l+}^{I}} - 1\right)\right.$$
$$\left. + \sqrt{l}\,Y_l^{-}\left(e^{2i\delta_{l-}^{I}} - 1\right)\right\}. \quad (2)$$

Wir entwickeln die Funktionen $\Phi_{I_z}^{I}$ nach den Eigenfunktionen des Operators I_z:

$$\Phi_{I_z}^{I} = C_{I_z}^{I\tau_z}\,\delta(\pi - \pi_i)\,\delta(n - \tau_z) + C_{I_z}^{I,-\tau_z}\,\delta(\pi - \pi_k)\,\delta(n + \tau_z). \quad (3)$$

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten $C_{I_z}^{I\tau_z}$ sind in der Tabelle der Aufgabe 9.29. angegeben; ferner gilt $\pi_k = \pi_i + 2\tau_z$.

Setzen wir (3) in (2) ein, so folgt

$$f = \frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{I}\sum_{l=0}^{\infty}\{G_{I_z\tau_z}^{I\tau_z}\,\delta(\pi - \pi_i)\,\delta(n - \tau_z)$$
$$+ G_{I_z,-\tau_z}^{I\tau_z}\,\delta(\pi - \pi_k)\,\delta(n + \tau_z)\}$$
$$\times\left\{\sqrt{l+1}\,Y_l^{+}\left(e^{2i\delta_{l+}^{I}} - 1\right) + \sqrt{l}\,Y_l^{-}\left(e^{2i\delta_{l-}^{I}} - 1\right)\right\},$$

wobei

$$G^{I\tau_z}_{I_z\tau_z'} = C^{I\tau_z}_{I_z} C^{I\tau_z'}_{I_z}$$

ist und τ_z' den Endzustand des Nukleons kennzeichnet.

Setzen wir nun

$$f = f^{\tau_z}_{\tau_z} \delta(\pi - \pi_i)\, \delta(n - \tau_z) + f^{\tau_z}_{\tau_z} \delta(\pi - \pi_k)\, \delta(n + \tau_z),$$

so erhalten wir

$$f^{\tau_z}_{\tau_z'} = \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sum_I \sum_{l=0}^{\infty} G^{I\tau_z}_{I_z\tau_z'} \left\{ \sqrt{l+1}\, Y_l^+ \left(e^{2i\delta^I_{l+}} - 1 \right) + \sqrt{l}\, Y_l^- \left(e^{2i\delta^I_{l-}} - 1 \right) \right\}, \tag{4}$$

wobei die Größen $G^{I\tau_z}_{I_z\tau_z'}$ für die betrachteten Reaktionen in der Tabelle angegeben sind:

Reaktion	$p^+ \to p^+$	$p^- \to p^-$	$p^- \to n^0$
$G^{3/2\,\tau_z}_{I_z\,\tau_z'}$	1	$\frac{1}{3}$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$
$G^{1/2\,\tau_z}_{I_z\,\tau_z'}$	0	$\frac{2}{3}$	$-\frac{\sqrt{2}}{3}$

Setzen wir diese Werte in (4) ein, so ergibt sich schließlich

$$\begin{aligned}
f(p^+, p^+) &= \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \sqrt{l+1}\, Y_l^+ \left(e^{2i\delta^{3/2}_{l+}} - 1 \right) + \sqrt{l}\, Y_l^- \left(e^{2i\delta^{3/2}_{l-}} - 1 \right) \right\}, \\
f(p^-, p^-) &= \frac{\sqrt{\pi}}{3ik} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \sqrt{l+1}\, Y_l^+ \left(e^{2i\delta^{3/2}_{l+}} + 2e^{2i\delta^{1/2}_{l+}} - 3 \right) + \sqrt{l}\, Y_l^- \left(e^{2i\delta^{3/2}_{l-}} + 2e^{2i\delta^{1/2}_{l-}} - 3 \right) \right\}, \\
f(p^-, n^0) &= \frac{\sqrt{2\pi}}{3ik} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \sqrt{l+1}\, Y_l^+ \left(e^{2i\delta^{3/2}_{l+}} - e^{2i\delta^{1/2}_{l+}} \right) + \sqrt{l}\, Y_l^- \left(e^{2i\delta^{3/2}_{l-}} - e^{2i\delta^{1/2}_{l-}} \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{5}$$

9.31.[1]) In der Tabelle sind die Koeffizienten $G_{I_z \tau_z}^{I \tau_z}{}'$ für alle möglichen Reaktionen von Mesonen mit Nukleonen angegeben:

Nr.	Reaktion	I_z	$G_{I_z\,\tau_z'}^{3/2\,\tau_z}$	$G_{I_z\,\tau_z'}^{1/2\,\tau_z}$
1	$p^+ \to p^+$	$\frac{3}{2}$	1	0
2	$p^0 \to p^0$	$\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$
3	$p^0 \to n^+$	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$-\frac{\sqrt{2}}{3}$
4	$p^- \to n^0$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$-\frac{\sqrt{2}}{3}$
5	$p^- \to p^-$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$
6	$n^+ \to n^+$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$
7	$n^0 \to p^-$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$-\frac{\sqrt{2}}{3}$
8	$n^+ \to p^0$	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$-\frac{\sqrt{2}}{3}$
9	$n^0 \to n^0$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$
10	$n^- \to n^-$	$-\frac{3}{2}$	1	0

Wegen der Annahme über die Isospininvarianz hängen die Phasen nicht von I_z ab, und aus der Tabelle und der Gleichung (4) der vorigen Aufgabe folgt sofort

1. $f(p^+, p^+) = f(n^-, n^-)$,

2. $f(p^-, p^-) = f(n^+, n^+)$,

3. $f(p^0, n^+) = f(n^+, p^0) = f(p^-, n^0) = f(n^0, p^-)$,

4. $f(p^0, p^0) = f(n^0, n^0)$.

Die Ausdrücke für die ersten drei Amplituden wurden in der vorigen Aufgabe angegeben. Aus der Tabelle entnimmt man

$$f(p^0, p^0) = \frac{1}{2}\,[f(p^+, p^+) + f(p^-, p^-)].$$

[1]) Vgl. Fußnote zu S. 288.

Wir erhielten mit Hilfe der Tabelle

1. $f(p^+, p^+) = f(n^-, n^-) = f^{3/2}$,

2. $f(p^-, p^-) = f(n^+, n^+) = \frac{1}{3}[f^{3/2} + 2f^{1/2}]$,

3. $f(p^0, n^+) = f(n^+, p^0) = f(p^-, n^0) = f(n^0, p^-) = \frac{\sqrt{2}}{3}[f^{3/2} - f^{1/2}]$,

4. $f(p^0, p^0) = f(n^0, n^0) = \frac{1}{3}[2f^{3/2} + f^{1/2}]$.

9.32. Wir haben den differentiellen Streuquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \quad \text{mit} \quad d\Omega = \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$$

und den totalen Streuquerschnitt

$$\sigma = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |f|^2 \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi .$$

Setzen wir die in der Aufgabe 9.30. bes immten Streuamplituden ein und berücksichtigen die Orthonormalität der PAULI-Funktionen:

$$\iint (Y_l^+)^* (Y_{l'}^+)\, d\Omega = \iint (Y_l^-)^* (Y_{l'}^-)\, d\Omega = \delta_{ll'},$$

$$\iint (Y_l^+)^* (Y_{l'}^-)\, d\Omega = \iint (Y_l^-)^* (Y_{l'}^+)\, d\Omega = 0,$$

so erhalten wir

$$\sigma(p^+, p^+) = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\{(l+1)\sin^2\delta_{l+}^{3/2} + l\sin^2\delta_{l-}^{3/2}\},$$

$$\sigma(p^-, p^-) = \frac{4\pi}{3k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\{(l+1)$$

$$\times\left[\sin^2\delta_{l+}^{3/2} + 2\sin^2\delta_{l+}^{1/2} - \frac{2}{3}\sin^2(\delta_{l+}^{3/2} - \delta_{l+}^{1/2})\right]$$

$$+ l\left[\sin^2\delta_{l-}^{3/2} + 2\sin^2\delta_{l-}^{1/2} - \frac{2}{3}\sin^2(\delta_{l-}^{3/2} - \delta_{l-}^{1/2})\right]\},$$

$$\sigma(p^-, n^0) = \frac{8\pi}{9k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\{(l+1)\sin^2(\delta_{l+}^{3/2} - \delta_{l+}^{1/2}) + l\sin^2(\delta_{l-}^{3/2} - \delta_{l-}^{1/2})\}.$$

9.33. Wir geben eine detaillierte Lösung für die Reaktion (p^+, p^+). Die Streuamplitude lautet für die S- und P-Wellen (vgl. Aufgabe 9.30.)

$$f(p^+, p^+) = \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \{\alpha_0 Y_0^+ + \sqrt{2}\,\alpha_1 Y_1^+ + \beta_1 Y_1^-\}$$

mit

$$\alpha_0 = e^{2i\delta_0^{3/2}} - 1; \quad \alpha_1 = e^{2i\delta_{1+}^{3/2}} - 1; \quad \beta_1 = e^{2i\delta_{1-}^{3/2}} - 1 .$$

Damit folgt der differentielle Streuquerschnitt für die S- und P-Wellen (wir berücksichtigen hier die explizite Form der PAULI-Funktion; vgl. Aufgabe 9.29.)

$$\frac{k^2}{\pi}\frac{d\sigma}{d\Omega} = |Y_{00}|^2 |\alpha_0|^2$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{3}} |Y_{00}|\,|Y_{10}|\,\{2(\alpha_0\alpha_1^* + \alpha_0^*\alpha_1) + (\alpha_0\beta_1^* + \alpha_0^*\beta_1)\}$$

$$+ \frac{1}{3} |Y_{10}|^2 \{4|\alpha_1|^2 + |\beta_1|^2 + 2(\alpha_1\beta_1^* + \alpha_1^*\beta_1)\}$$

$$+ \frac{2}{3} |Y_{11}|^2 \{|\alpha_1|^2 + |\beta_1|^2 - (\alpha_1\beta_1^* + \alpha_1^*\beta_1)\}.$$

Mit Hilfe der Kugelfunktionen

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\vartheta, \quad Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\vartheta\, e^{i\varphi}$$

können wir für den differentiellen Streuquerschnitt schreiben

$$k^2 \frac{d\sigma}{d\Omega} = A + B\cos\vartheta + C\cos^2\vartheta \tag{1}$$

mit den Koeffizienten

$$A = \frac{1}{4} \{|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 + |\beta_1|^2 - (\alpha_1\beta_1^* + \alpha_1^*\beta_1)\},$$

$$B = \frac{1}{4} \{2(\alpha_0\alpha_1^* + \alpha_0^*\alpha_1) + (\alpha_0\beta_1^* + \alpha_0^*\beta_1)\},$$

$$C = \frac{3}{4} \{|\alpha_1|^2 + (\alpha_1\beta_1^* + \alpha_1^*\beta_1)\}.$$

Mit Hilfe der Identitäten

$$|e^{2ix} - 1|^2 = 4\sin^2 x,$$

$$(e^{2ix} - 1)(e^{-2iy} - 1) + (e^{-2ix} - 1)(e^{2iy} - 1) = 4[\sin^2 x + \sin^2 y - \sin^2(x - y)]$$

können wir die Koeffizienten A, B, C durch die Streuphasen ausdrüc

$$A(p^+, p^+) = \sin^2 \delta_0^{3/2} + \sin(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}),$$

$$B(p^+, p^+) = 3\sin^2 \delta_0^{3/2} + 2\sin^2 \delta_{1+}^{3/2} + \sin^2 \delta_{1-}^{3/2} - 2\sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_{1+}^{3/2}) - \sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}),$$

$$C(p^+, p^+) = 3\{2\sin^2 \delta_{1+}^{3/2} + \sin^2 \delta_{1-}^{3/2} - \sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}).$$

Nach dem angegebenen Verfahren lassen sich die Koeffizienten A, . für die Reaktionen (p^-, p^-) und (p^-, n^0) leicht bestimmen. Wir geben nur die Endergebnisse an:

$$A(p^-, p^-) = \frac{1}{3}\sin^2 \delta_0^{3/2} + \frac{2}{3}\sin^2 \delta_0^{1/2} - \frac{2}{9}\sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_0^{1/2}) + \frac{1}{9}\sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \frac{2}{9}\sin^2(\delta_{1-}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) + \frac{2}{9}\sin^2(\delta_{1-}^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}) + \frac{2}{9}\sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) + \frac{4}{9}\sin^2(\delta_{1-}^{1/2} - \delta_{1+}^{1/2}) - \frac{2}{9}\sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}),$$

$$B(p^-, p^-) = \sin^2 \delta_0^{3/2} + 2\sin^2 \delta_0^{1/2} + \frac{2}{3}\sin^2 \delta_{1+}^{3/2} + \frac{4}{3}\sin^2 \delta_{1+}^{1/2} + \frac{1}{3}\sin^2 \delta_{1-}^{3/2} + \frac{2}{3}\sin^2 \delta_{1-}^{1/2} - \frac{2}{9}\sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_{1+}^{3/2}) - \frac{4}{9}\sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}) - \frac{1}{9}\sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \frac{2}{9}\sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) - \frac{4}{9}\sin^2(\delta_0^{1/2} - \delta_{1+}^{3/2}) - \frac{8}{9}\sin^2(\delta_0^{1/2} - \delta_{1+}^{1/2}) - \frac{2}{9}\sin^2(\delta_0^{1/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \frac{4}{9}\sin^2(\delta_0^{1/2} - \delta_{1-}^{1/2}),$$

$$\left.\begin{aligned}
C(\mathrm{p}^-, \mathrm{p}^-) = {} & 2\sin^2\delta_{1+}^{3/2} + 4\sin^2\delta_{1+}^{1/2} + \sin^2\delta_{1-}^{3/2} + 2\sin^2\delta_{1-}^{1/2}\\
& - \frac{2}{3}\sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}) - \frac{1}{3}\sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2})\\
& - \frac{2}{3}\sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) - \frac{2}{3}\sin^2(\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{3/2})\\
& - \frac{2}{3}\sin^2(\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{1/2});
\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

$$\left.\begin{aligned}
A(\mathrm{p}^-, \mathrm{n}^0) = {} & \frac{2}{9}\{\sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_0^{1/2}) + \sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2})\\
& + \sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2})\\
& - \sin^2(\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{3/2}) + \sin^2(\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{1/2})\\
& + \sin^2(\delta_{1-}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2})\},\\
B(\mathrm{p}^-, \mathrm{n}^0) = {} & \frac{2}{9}\{-2\sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_{1+}^{3/2}) + 2\sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2})\\
& - \sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) + \sin^2(\delta_0^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2})\\
& + 2\sin^2(\delta_0^{1/2} - \delta_{1+}^{3/2}) - 2\sin^2(\delta_0^{1/2} - \delta_{1+}^{1/2})\\
& + \sin^2(\delta_0^{1/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \sin^2(\delta_0^{1/2} - \delta_{1-}^{1/2})\},\\
C(\mathrm{p}^-, \mathrm{n}^0) = {} & \frac{2}{3}\{\sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}) + \sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2})\\
& - \sin^2(\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) + \sin^2(\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{3/2})\\
& - \sin^2(\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{1/2})\}.
\end{aligned}\right\} \tag{4}$$

Die gewonnenen Ergebnisse sind sehr wichtig für das Studium der Winkelverteilung von π-Mesonen, die an Protonen gestreut werden. Es ist möglich, die Formel (1) experimentell zu verifizieren und die Koeffizienten A, B, C für die Reaktionen $(\mathrm{p}^+, \mathrm{p}^+)$, $(\mathrm{p}^-, \mathrm{p}^-)$, $(\mathrm{p}^-, \mathrm{n}^0)$ zu bestimmen. Wir erhalten dann aus den neun Gl. (2), (3) und (4) die sechs unbekannten Streuphasen $\delta_0^{3/2}$, $\delta_0^{1/2}$, $\delta_{1+}^{3/2}$, $\delta_{1-}^{3/2}$, $\delta_{1+}^{1/2}$, $\delta_{1-}^{1/2}$, die sich als miteinander verträglich erweisen.

Die so bestimmten Streuphasen sind jedoch aus zwei Gründen nicht eindeutig. Erstens sind die Vorzeichen der Streuphasen unbestimmt, weil die Gl. (2), (3), (4) die Sinus der Phasen und ihre Differenzen quadratisch enthalten, und zweitens gibt es mehrere verschiedene Sätze von Streuphasen, die den

experimentellen Bedingungen genügen. Unter diesen befindet sich die FERMI-Lösung in der besten Übereinstimmung mit dem Experiment. In ihr rührt der Hauptbeitrag zur Streuung von der Phasenverschiebung $\delta_{1+}^{3/2}$ her, die bei der Mesonenenergie $E \approx 195$ MeV im Laborsystem durch 90° geht, während die Streuphasen $\delta_{1-}^{3/2}$, $\delta_{1+}^{1/2}$, $\delta_{1-}^{1/2}$ klein sind.

Es gibt eine Reihe zusätzlicher Kriterien, die es gestatten, die angegebenen Unbestimmtheiten zu eliminieren. Die Vorzeichen der Streuphasen können mit Hilfe von Überlegungen, die auf dem Kausalitätsprinzip beruhen, sowie durch Experimente bestimmt werden, besonders, wenn man die COULOMB-Wechselwirkung berücksichtigt. Bei der Auswahl der richtigen Lösung könnten Versuche mit polarisierten Rückstoßnukleonen nützlich sein, jedoch wurden solche Experimente bisher nicht durchgeführt. Die bei den Reaktionen (p^+, p^+), (p^-, p^-), (p^-, p^0) zu erwartenden Polarisationen werden in der nächsten Aufgabe bestimmt.

9.34. Wir werden die Reaktion (p^+, p^+) ausführlich untersuchen. Die Spinfunktionen der Protonen sind

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{für} \quad m_s = \frac{1}{2},$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{für} \quad m_s = -\frac{1}{2}.$$

Ist für das Proton zu Anfang $m_s = \frac{1}{2}$, so kann die Streuamplitude geschrieben werden

$$f_{1/2} = f_{\alpha\alpha}\alpha + f_{\alpha\beta}\beta. \tag{1}$$

Andererseits ergibt sich die Streuamplitude, wenn anfangs $m_s = -\frac{1}{2}$ gilt, zu

$$f_{-1/2} = f_{\beta\alpha}\alpha + f_{\beta\beta}\beta; \tag{2}$$

dabei sind $f_{\alpha\alpha}, f_{\beta\beta}$ die Streuamplituden ohne Änderung der Spinrichtung und $f_{\alpha\beta}, f_{\beta\alpha}$ die Streuamplituden bei Änderung der Spinrichtung. Die Amplituden $f_{\alpha\alpha}$ und $f_{\alpha\beta}$ sind durch die Gl. (5) der Aufgabe 9.30. als Koeffizienten der Matrizen $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ gegeben, wobei nur S- und P-Wellen berücksichtigt werden:

$$f_{\alpha\alpha} = \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \left\{ \alpha_0 Y_{00} + \frac{1}{\sqrt{3}} [2\alpha_1 + \beta_1] Y_{10} \right\}, \tag{3}$$

$$f_{\alpha\beta} = \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sqrt{\frac{2}{3}} (\beta_1 - \alpha_1) Y_{11}. \tag{4}$$

Dabei sind α_0, α_1, β_1 die in der vorigen Aufgabe angegebenen Größen. Benutzen wir die Beziehungen für die PAULI-Funktionen für $m_j = 1/2$, so finden wir

$$f_{\beta\alpha} = \frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sqrt{\frac{2}{3}}(\alpha_1 - \beta_1)\,Y_{1,-1},$$

$$f_{\beta\beta} = f_{\alpha\alpha}.$$

Nehmen wir an, daß die π-Mesonen in der xz-Ebene gestreut werden, so ist der Polarwinkel φ gleich Null, und es folgt

$$f_{\alpha\beta} = -f_{\beta\alpha}.$$

Die Amplitude für die Streuung an einem Proton mit $s_z = -1/2$ [siehe Gl.(2)] ist dann

$$f_{-1/2} = -f_{\beta\alpha}\alpha + f_{\alpha\alpha}\beta. \tag{5}$$

Da die Protonen am Anfang nicht polarisiert waren, ergibt sich aus den Formeln (1) und (5), daß sie auch nach der Streuung bezüglich der z-Achse nicht polarisiert sind.

Wir können zeigen, daß die Protonen nach der Streuung auch in der xz-Ebene nicht polarisiert sind. Tatsächlich lauten die Spinfunktionen γ_ϑ und δ_ϑ des Protons, welche den Werten $1/2$ und $-1/2$ der Spinkomponente in z'-Richtung entsprechen, wobei die in der xz-Ebene liegende z'-Achse mit der z-Achse den Winkel ϑ bildet,

$$\begin{pmatrix}\gamma_\vartheta\\ \delta_\vartheta\end{pmatrix} = e^{-is_y\vartheta}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\frac{\vartheta}{2} & -\sin\frac{\vartheta}{2}\\ \sin\frac{\vartheta}{2} & \cos\frac{\vartheta}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$$

(vgl. Aufgabe 4.20.).

Es gilt daher

$$\begin{aligned} f_{1/2} &= f_{\alpha\alpha}\alpha + f_{\alpha\beta}\beta \\ &= \left(f_{\alpha\alpha}\cos\frac{\vartheta}{2} - f_{\alpha\beta}\sin\frac{\vartheta}{2}\right)\gamma_\vartheta + \left(f_{\alpha\alpha}\sin\frac{\vartheta}{2} + f_{\alpha\beta}\cos\frac{\vartheta}{2}\right)\delta_\vartheta, \\ f_{-1/2} &= -f_{\alpha\beta}\alpha + f_{\alpha\alpha}\beta \\ &= -\left(f_{\alpha\alpha}\sin\frac{\vartheta}{2} + f_{\alpha\beta}\cos\frac{\vartheta}{2}\right)\gamma_\vartheta + \left(f_{\alpha\alpha}\cos\frac{\vartheta}{2} - f_{\alpha\beta}\sin\frac{\vartheta}{2}\right)\delta_\vartheta, \end{aligned}$$

d. h., es gibt in keiner Richtung in der xz-Ebene eine Polarisation.

Die Protonen werden jedoch in Richtung der y-Achse senkrecht zur Streuebene polarisiert. Um die Größe der Polarisation zu bestimmen, drücken wir

$f_{1/2}$ und $f_{-1/2}$ durch die Spineigenfunktionen

$$\gamma = \frac{\alpha + i\beta}{\sqrt{2}}, \quad \delta = \frac{\alpha - i\beta}{\sqrt{2}}$$

aus, die den Spinrichtungen parallel bzw. antiparallel zur y-Achse entsprechen. Es gilt

$$f_{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{\alpha\alpha} - if_{\alpha\beta})\gamma + \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{\alpha\alpha} + if_{\alpha\beta})\delta,$$

$$f_{-1/2} = -\frac{i}{\sqrt{2}}(f_{\alpha\alpha} - if_{\alpha\beta})\gamma + \frac{i}{\sqrt{2}}(f_{\alpha\alpha} + if_{\alpha\beta})\delta.$$

Daraus erhalten wir

$$W_+ \sim |f_{\alpha\alpha} - if_{\alpha\beta}|^2, \quad W_- \sim |f_{\alpha\alpha} + if_{\alpha\beta}|^2, \tag{6}$$

wobei W_+ und W_- die Wahrscheinlichkeiten dafür sind, nach der Streuung die Spinrichtungen parallel bzw. antiparallel zur y-Achse vorzufinden. Wir beachten, daß die Beziehungen (6) unabhängig vom Anfangswert s_z des Protons gelten. Setzen wir in (6) die Ausdrücke (3) und (4) für $f_{\alpha\alpha}$ und $f_{\alpha\beta}$ ein, so erhalten wir

$$W_\pm \sim |\alpha_0 + (2\alpha_1 + \beta_1)\cos\vartheta \mp i(\beta_1 - \alpha_1)\sin\vartheta|^2$$

oder

$$W_\pm \sim \left|\left(e^{2i\delta_0^{3/2}} - 1\right) + \left(2e^{2i\delta_{1+}^{3/2}} - 3 + e^{2i\delta_{1-}^{3/2}}\right)\cos\vartheta \right.$$
$$\left. \pm i\left(e^{2i\delta_{1+}^{3/2}} - e^{2i\delta_{1-}^{3/2}}\right)\sin\vartheta\right|^2.$$

Analog finden wir für die Reaktionen (p^-, p^-) und (p^-, n^0):

$$W_\pm(p^-, p^-) \sim \left|\left(e^{2i\delta_0^{3/2}} - 3 + 2e^{2i\delta_0^{1/2}}\right)\right.$$
$$+ \left(2e^{2i\delta_{1+}^{3/2}} - 9 + 4e^{2i\delta_{1+}^{1/2}} + e^{2i\delta_{1-}^{3/2}} - 2e^{2i\delta_{1-}^{1/2}}\right)\cos\vartheta$$
$$\left.\pm i\left(e^{2i\delta_{1+}^{3/2}} + 2e^{2i\delta_{1+}^{1/2}} - e^{2i\delta_{1-}^{3/2}} - 2e^{2i\delta_{1-}^{1/2}}\right)\cos\vartheta\right|^2,$$

$$W_\pm(p^-, n^0) \sim \left|\left(e^{2i\delta_0^{3/2}} - e^{2i\delta_0^{1/2}}\right)\right.$$
$$+ \left(2e^{2i\delta_{1+}^{3/2}} - 2e^{2i\delta_{1+}^{1/2}} + e^{2i\delta_{1-}^{3/2}} - e^{2i\delta_{1-}^{1/2}}\right)\cos\vartheta$$
$$\left.\pm i\left(e^{2i\delta_{1+}^{3/2}} - e^{2i\delta_{1+}^{1/2}} - e^{2i\delta_{1-}^{3/2}} + e^{2i\delta_{1-}^{1/2}}\right)\sin\vartheta\right|^2.$$

ANHANG I

Eine Reihe von Problemen der Quantenmechanik wird mit Hilfe der quasiklassischen Näherung gelöst, die jedoch nur in einem genügend weit von dem durch die Bedingung

$$V(x) = E$$

definierten Umkehrpunkt brauchbar ist. Da die quasiklassische Näherung nur rechts und links vom Umkehrpunkt Lösungen liefert, muß man die Lösungen im Umkehrpunkt aneinander anschließen, um eine Lösung im gesamten Raum zu erhalten.

Besitzt die Potentialfunktion in der Nähe des Umkehrpunktes die in der Abb. 32 gezeigte Form, so lautet die Lösung

$$\psi_1 = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{p}} \sin\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^a p\,dx + \dfrac{\pi}{4}\right) & \text{für } x < a, \quad (1) \\ \dfrac{1}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_a^x |p|\,dx\right) & \text{für } x > a. \quad (2) \end{cases}$$

Für die in der Abb. 33 dargestellte Potentialfunktion $V(x)$ haben wir die Lösung

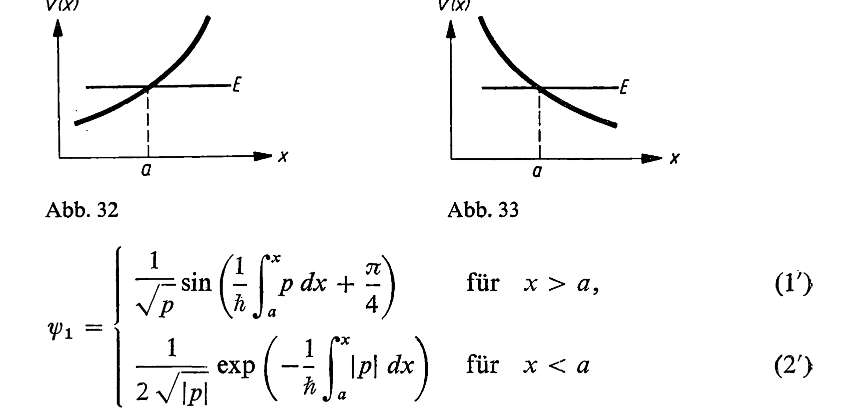


Abb. 32 Abb. 33

$$\psi_1 = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{p}} \sin\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_a^x p\,dx + \dfrac{\pi}{4}\right) & \text{für } x > a, \quad (1') \\ \dfrac{1}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_a^x |p|\,dx\right) & \text{für } x < a \quad (2') \end{cases}$$

(siehe z. B. LANDAU und LIFSCHIZ, Quantenmechanik).

Unter Benutzung dieser Ausdrücke suchen wir diejenige Lösung der eindimensionalen SCHRÖDINGER-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\,\psi = E\psi,$$

welche links vom Umkehrpunkt (siehe Abb. 32) die quasiklassische Form

$$\frac{1}{\sqrt{p}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_x^a p dx}$$

annimmt. Um diese Lösung zu erhalten, ist eine andere Lösung zu finden, die von den Lösungen (1) und (2) linear unabhängig ist. Wir setzen sie an in der Form

$$\psi_2 = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^a p\,dx + \dfrac{\pi}{4}\right) & \text{für} \quad x < a, \qquad (3) \\[2ex] \dfrac{c}{\sqrt{p}} \exp\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_a^x |p| dx\right) & \text{für} \quad x > a. \qquad (4) \end{cases}$$

Zur Bestimmung von c benutzen wir die Tatsache, daß für die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$W = \begin{vmatrix} \psi_1 & \psi_1' \\ \psi_2 & \psi_2' \end{vmatrix} = \text{const}$$

gilt. Mit Hilfe der Lösungen (1) und (3) erhalten wir die WRONSKI-Determinante

$$W = \begin{vmatrix} \dfrac{1}{\sqrt{p}} \sin\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^a p\,dx + \dfrac{\pi}{4}\right) & -\dfrac{\sqrt{p}}{\hbar} \cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^a p\,dx + \dfrac{\pi}{4}\right) \\[2ex] \dfrac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^a p\,dx + \dfrac{\pi}{4}\right) & \dfrac{\sqrt{p}}{\hbar} \sin\left(\dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_x^a p\,dx + \dfrac{\pi}{4}\right) \end{vmatrix} = \frac{1}{\hbar}.$$

(Wegen $d(\hbar/p)/dx \ll 1$ genügt es, nach den trigonometrischen Funktionen zu differenzieren.) Analog finden wir im Gebiet $x > a$, d. h. für die Lösungen (2) und (4), die WRONSKI-Determinante

$$W = \frac{c}{\hbar}.$$

Aus der Bedingung $W(x < a) = W(x > a)$ erhalten wir $c = 1$. Wir finden die gesuchte Lösung als Linearkombination der Funktionen ψ_1 und ψ_2:

$$\psi = (\psi_2 \pm i\psi_1) e^{\mp i\frac{\pi}{4}},$$

oder eingesetzt

$$\psi = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{p}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_x^a p\,dx} & \text{für} \quad x < a, \\[2ex] \dfrac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx \mp i \frac{\pi}{4}} + \dfrac{1}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx \pm i \frac{\pi}{4}} & \text{für} \quad x > a. \end{cases}$$

Wir suchen nun diejenige Lösung der eindimensionalen SCHRÖDINGER-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\,\psi = E\psi,$$

welche links vom Umkehrpunkt (siehe Abb. 33) in die quasiklassische Lösung

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}}\,\mathrm{e}^{\pm\frac{i}{\hbar}\int_x^a |p|dx}$$

übergeht. Zur Bestimmung dieser Lösung benutzen wir die oben angeführten Resultate. Die gesuchte Lösung wird eine Linearkombination der Lösungen ψ_1' und ψ_2' sein, wobei

$$\psi_1' = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{p}}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\int_a^x p dx} & \text{für} \quad x > a, \\ \dfrac{1}{\sqrt{|p|}}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\int_x^a |p|dx - i\frac{\pi}{4}} + \dfrac{1}{2\sqrt{|p|}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|dx + i\frac{\pi}{4}} & \text{für} \quad x < a, \end{cases}$$

$$\psi_2' = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{p}}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p dx} & \text{für} \quad x > a, \\ \dfrac{1}{\sqrt{|p|}}\,\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|dx + i\frac{\pi}{4}} + \dfrac{1}{2\sqrt{|p|}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|dx - i\frac{\pi}{4}} & \text{für} \quad x < a. \end{cases}$$

Wir erhalten also

$$\psi = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{|p|}}\,\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|dx} & \text{für} \quad x < a, \\ \dfrac{1}{2\sqrt{p}}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\int_a^x p dx + i\frac{\pi}{4}} + \dfrac{1}{2\sqrt{p}}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p dx - i\frac{\pi}{4}} & \text{für} \quad x < a, \end{cases}$$

$$\psi = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{|p|}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^a |p|dx} & \text{für} \quad x < a, \\ \dfrac{1}{\sqrt{p}}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\int_a^x p dx - i\frac{\pi}{4}} + \dfrac{1}{\sqrt{p}}\,\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\int_a^x p dx + i\frac{\pi}{4}} & \text{für} \quad x > a. \end{cases}$$

ANHANG II

Eine ganze Reihe empirischer Daten (z. B. die Streuung von π-Mesonen an Protonen und Neutronen) deutet darauf hin, daß Proton und Neutron sich ineinander umwandeln können. Aus diesem Grund betrachten wir Proton und Neutron als ein Teilchen, das Nukleon, das sich im Zustand des Protons und des Neutrons befinden kann. Diese Zustände unterscheiden sich durch die Ladungsvariable: Die Ladung des Protons ist gleich 1 (in Einheiten e), diejenige des Neutrons gleich 0. Das Nukleon kann also, den beiden Werten der Ladungsvariablen entsprechend, durch eine zweikomponentige Wellenfunktion beschrieben werden. Wir schreiben diese Funktion in der Form

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_p \\ \psi_n \end{pmatrix}.$$

Mit Rücksicht auf die Normierungsbedingung

$$|\psi_p|^2 + |\psi_n|^2 = 1$$

wählen wir

$$\psi_p = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Wir führen Operatoren ein, die auf diese zweikomponentigen Funktionen wirken:

$$\tau_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Man verifiziert leicht die Gleichungen

$$\tau_+\psi_p = 0, \quad \tau_-\psi_p = \psi_n,$$

$$\tau_+\psi_n = \psi_p, \quad \tau_-\psi_n = 0.$$

Wie man sieht, ist τ_+ der Erzeugungsoperator der Ladung, der das Nukleon vom Zustand des Neutrons in den Zustand des Protons überführt, während τ_- der Vernichtungsoperator der Ladung ist.

Wir führen nun neue Operatoren ein:

$$\tau_x = \frac{1}{2}(\tau_+ + \tau_-) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\tau_y = -\frac{i}{2}(\tau_+ + \tau_-) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\tau_z = \frac{1}{2}(\tau_+\tau_- - \tau_-\tau_+) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

die mit den aus der Theorie des Spins bekannten PAULI-Matrizen identisch sind und daher auch dieselben formalen Eigenschaften wie diese besitzen. In Analogie zur Theorie des Spins nehmen wir an, daß die Operatoren τ_x, τ_y, τ_z die Komponenten des Vektors $\vec{\tau}$ in einem dreidimensionalen Raum sind.

Dieser Raum wird als Isospinraum und der Vektor $\vec{\tau}$ als Isospin des Nukleons bezeichnet. Wir weisen darauf hin, daß der Begriff des Isospinraums nur eine Bezeichnung ist und keine direkte physikalische Bedeutung besitzt. Der Absolutbetrag des Vektors $\vec{\tau}$ ist gleich $\frac{1}{2}$, und die beiden Ladungszustände des Nukleons können als Zustände mit verschiedenen Werten der z-Komponente des Isospins im Isospinraum aufgefaßt werden. Für $\tau_z = \frac{1}{2}$ haben wir es mit einem Proton, für $\tau_z = -\frac{1}{2}$ mit einem Neutron zu tun. Da der Isospinraum und der Isospin formale Begriffe sind, besitzt nicht der Operator τ_z, sondern der Ladungsaustauschoperator

$$q = \tau_z + \frac{1}{2} I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

physikalische Bedeutung.

Die Mesonen π^+, π^0, π^- können ebenfalls als die drei den Ladungsvariablen 1, 0, -1 entsprechenden Ladungszustände eines Teilchens aufgefaßt werden. Entsprechend den drei möglichen Ladungszuständen wird die Wellenfunktion des π-Mesons natürlich eine dreikomponentige Größe sein:

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_+ \\ \varphi_0 \\ \varphi_- \end{pmatrix}.$$

Mit Rücksicht auf die Normierungsbedingung setzen wir

$$\varphi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Wir können auch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren der Ladung des π-Mesons einführen:

$$T_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Diese Operatoren genügen den Relationen

$$T_+\varphi_+ = 0, \quad T_+\varphi_0 = \varphi_+, \quad T_+\varphi_- = \varphi_0,$$

$$T_-\varphi_+ = \varphi_0, \quad T_-\varphi_0 = \varphi_-, \quad T_-\varphi_- = 0.$$

Wir gehen nun über zu den Operatoren

$$T_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(T_+ + T_-) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$T_y = \frac{i}{\sqrt{2}}(T_+ - T_-) = \frac{i}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$T_z = T_+T_- - T_-T_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Das sind gerade die Operatoren der Komponenten des Isospinvektors $\mathfrak{T}$ im Isospinraum. Der absolute Betrag von $\mathfrak{T}$ ist gleich 1. Die verschiedenen Ladungszustände werden Zustände mit verschiedenen Werten der z-Komponente des Isospins im Isospinraum sein. Wir bemerken noch, daß für das π-Meson der Ladungsoperator Q mit dem Operator T_z identisch ist:

$$Q = T_z.$$

Wir untersuchen nun die Isospineigenschaften des Nukleon-Meson-Systems. Wir werden dieses System durch den Gesamtisospin

$$\mathfrak{I} = \vec{\tau} + \mathfrak{T}$$

und seine Komponente I_z charakterisieren.

Auf Grund der heute zur Verfügung stehenden experimentellen Daten kann man annehmen, daß die Hypothese der Isospininvarianz (Ladungsunabhängigkeit) für das Meson-Nukleon-System zutrifft. Die Hypothese sagt aus, daß die Eigenschaften des Systems nicht von seiner Gesamtladung abhängen, wenn die COULOMB-Kräfte vernachlässigbar klein sind. Mathematisch kann man diesen Sachverhalt als Invarianz des HAMILTON-Operators der Wechselwirkung bezüglich Drehungen im dreidimensionalen Isospinraum ausdrücken. Daraus folgt sofort, daß der Gesamtisospin $\mathfrak{I}$ und seine z-Komponente I_z Erhaltungsgrößen des Meson-Nukleon-Systems sind.

